

柔らかい分子集団系における「くっつく／離れる」の理論解析 依頼講演

【発表番号】 D2002

【登録タイトル】 拡張型の溶媒和概念に基づく均一・不均一溶液系の自由エネルギー解析

【一般向け解説概要】

溶ける／溶けないは日常生活での感覚であり、溶質・溶媒の概念は、多くの人に馴染み深い。溶液中の少数成分である溶質は、主要成分である溶媒に囲まれる。これが溶媒和であり、溶質－溶媒相互作用を通して、溶液中での溶質の安定性が決まる。本研究では、溶媒和の概念を拡張し、通常の溶液・ミセル・脂質膜などの様々な分子集団系への物質結合（「くっつく vs 離れる」）を均一または不均一条件での溶媒和ととらえる。様々な系を統一的・横断的枠組の中で扱う手法の開発によって、分野をまたがるものの見方、つまり、「一を聞いて十を知る」方法の確立が期待される。

【発表者（○；登壇者／下線；連絡担当者）】 京大化研 ○松林伸幸

京都府宇治市五ヶ庄、0774-38-3071、nobuyuki@scl.kyoto-u.ac.jp

溶ける／溶けないは日常生活での感覚であり、溶質・溶媒の概念は、多くの人に馴染み深い。溶液中の少数成分である溶質は、主要成分である溶媒に囲まれる。これが溶媒和であり、溶質－溶媒相互作用を通して、溶液中での溶質の安定性が決まる。周囲の分子集団との相互作用による安定性という観点から、似たような現象は、いくらでも見出すことができる。ミセルの可溶化では、界面活性剤および水との相互作用を通して、ミセルへの取り込み強さが決定される。脂質膜・タンパク質への分子・基質結合の場合も同様である。似たような現象は、共通の概念・理論形式で取扱うことが望ましい。溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質のようなソフト分子（集団）に対する物質結合を、「溶媒和」として統一的に理解することが、本研究の目的である。そのために、溶質・溶媒の概念を拡張する。対象系における混合過程の前後に変わらず存在する成分を溶媒と呼び、混合後のみに系にある成分を溶質と呼ぶ。ミセルへの分子取り込み（可溶化）の場合、取り込まれる分子が溶質、界面活性剤と水が溶媒ということになる。この場合の溶媒は混合溶媒であり、ナノレベルで見ると不均一である。ミセル・脂質膜・タンパク質への分子結合を、不均一混合溶媒における溶媒和という枠の中で解析する。分子結合の理解には、どれだけ結合するか（結合量）、どこに結合するか（結合サイト）、どの程度の時間結合するか（結合寿命）が重要である。自由エネルギー計算によって、結合の強さとサイトを決定でき、結合寿命についても評価が可能である。本研究では、自由エネルギー解析のために、エネルギー表示の溶液理論を新たに定式化し、MD シミュレーションと組み合わせている。実験値と比較可能な精度を保ちつつ、自由エネルギー計算が飛躍的に高速化され、拡張型の溶媒和現象を統一的な枠組みの中で解析できるようになっている。代表的適用例は、以下の通りである。a) 超臨界水・熱水の水和効果に基づく C1 反応の制御。b) タンパク質の水和自由エネルギーと構造エネルギーの関係。c) ミセルや脂質膜への分子結合と、そこでの水の役割。d) 溶液中の還元過程。電子を「溶質」とし、不均一混合溶媒での溶媒和とみなす。