

双頭型両親媒性分子の自己会合に及ぼす分子の屈曲性の効果： 散逸粒子動力学シミュレーション

京工織大院工芸 ○筒井 岳英・藤原 進・水口 朋子・橋本 雅人

<緒言>

界面活性剤を代表とする両親媒性分子は、疎水効果により水中で自発的にミセルやベシクル、チューブといったナノスケールの自己会合体を形成する。これらの自己会合体は、温度や濃度、分子間相互作用により変化する。最近では、双頭型両親媒性分子によるナノチューブ形成の実験研究も行われているが、自己会合体の構造はナノスケールであるため、通常の実験で個々の自己会合体の形態や形成過程を解析することは困難である。本研究では、自己会合体の形成機構を明らかにするため、双頭型両親媒性分子と溶媒分子からなる系の散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーションを行った。

<シミュレーション>

本研究では、双頭型両親媒性分子を親水性粒子 A、C と疎水性粒子 B から構成される AB_3C 分子でモデル化し、溶媒粒子 S は 1 個の親水性粒子でモデル化した[1]。両親媒性分子の共有結合は、結合伸縮ポテンシャルと結合変角ポテンシャルで、非結合相互作用は保存力、散逸力、ランダム力の 3 つで記述した。また、保存力における粒子間の反発相互作用パラメータ a_{ij} を

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} & A & B & C & S \\ A & a_{AA} & 200 & 200 & 25 \\ B & 200 & 25 & 200 & 200 \\ C & 200 & 200 & a_{CC} & 25 \\ S & 25 & 200 & 25 & 25 \end{pmatrix}$$

右の式のように設定した ($10 \leq a_{CC} \leq a_{AA} \leq 50$)。初期配置として、双頭型両親媒性分子 1,000 個と溶媒粒子 40,000 個を数密度が 3.0 となるようにランダムに配置し、周期境界条件を用いた。温度は $k_B T = 0.64$ 、時間刻みは $\Delta t = 0.04$ とした。本研究では、親水性粒子 A 同士と C 同士の反発相互作用パラメータ a_{AA} と a_{CC} 、及び分子の剛直性を表す力の定数 k_b の様々な値に対して DPD シミュレーションを 1,000,000 ステップ行い、自己会合体の形状や形成過程の解析を行った。

<結果・考察>

a_{AA} 、 a_{CC} 及び k_b の様々な値に対する DPD シミュレーションで得られた自己会合体のスナップショットを Fig.1 に示す。この図から、(a) チューブ状ミセル、(b) ベシクル、(c) チューブ、(d) ひも状ミセル、(e) 板状ミセル、(f) 内部構造を有する球状ミセルが観察されることが分かった。詳細については当日発表する。

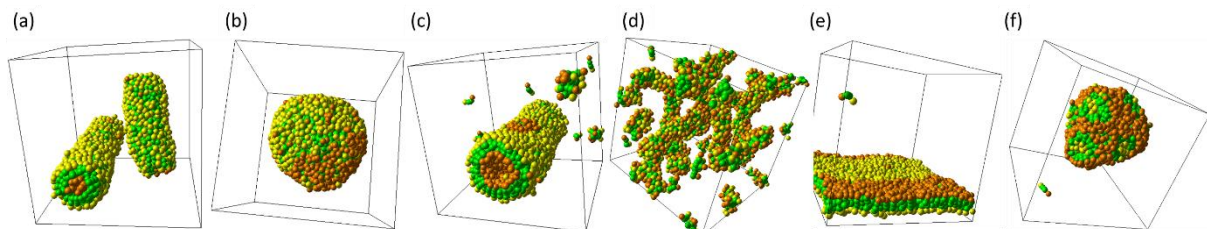


Fig.1. Snapshots of self-assembled structures formed by bolaamphiphilic molecules: (a) tubular micelles, (b) a vesicle, (c) a tube, (d) worm-like micelles, (e) a plate-like micelle and (f) a spherical micelle with internal structure. Solvent particles are not displayed for clarity.

<参考文献>

[1] Fujiwara, S.; Takahashi, Y.; Ikebe, H.; Mizuguchi, T.; Hashimoto, M.; Tamura, Y.; Nakamura, H.; Horiuchi, R. *Plasma Fusion Res.* **2016**, *11*, 2401073.