

課題名 (タイトル) :

機能性界面上における水滴の分子シミュレーション

利用者氏名 : 古石貴裕

所属 : 生命システム研究センター 生命モデリングコア 計算分子設計グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質は水中で疎水部分を会合させて、その形状を保っている。この会合は、水で満たされた系において、ナノメートルスケール以上の大きさを持つ疎水部分が近づいたとき、その間にある水分子は排除され、疎水部分間に引力が働くため生じる。この疎水部分間の会合は、生体内で物質輸送を行う分子モーターの動作原理に使用されていると考えられている。分子モーターはレールの役割を持つタンパク質に沿って、弱い結合と強い結合を繰り返しながら特定の方向に進む。この強い結合は疎水部間の会合によるものであり、会合のメカニズムが分子モーターの動作原理に密接に関わっていると考えられている。

そこで本研究では、水中に疎水原子からなる同じ大きさの板を近い距離で2つ配置し、重なった状態からそれぞれの板をずらした場合、板にどのような力が作用するかを、分子動力学(MD)シミュレーションを用いて詳しく解析する予定である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

水分子と疎水性の原子からなる系において MD シミュレーションを実行する予定であったが、今年度は主にシミュレーションの改良を行った。

3. 今年度の利用が無かった理由

本課題では自作の MD シミュレーションプログラムを使用している。本年度は、より粒子数の多い系での計算を目指し、MD シミュレーションプログラムの改良を行った。しかしながら、現在までに十分な高速化が達成できなかったため、今年度の実行を見送った。

来年度は引き続き MD シミュレーションプログラムの行い、高速化が達成された後に、本課題の計算を行う予定である。