

演 題	分子動力学法による尿素水溶液の動的構造解析	
発 表 者 (所 属)	○小林 修 (兵庫県立大・工)、佐々 和洋 (姫工大・工) 林 治尚 (兵庫県立大・学術総合情報センター)、中野英彦 (兵庫県立大・工)	
連 絡 先	〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻 中野英彦先生気付	
キーワード	分子動力学、尿素水溶液	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	分子動力学シミュレーションによる水溶液中での尿素分子および水分子の構造的 特徴を解析する。	
環 境	適 応 機 種 名	Fortran77 搭載機種
	O S 名	Linux RedHat ver.7.3
	ソース言語	Fortran77
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

【緒言】

高濃度尿素水溶液中でタンパク質は変性しはじめ、天然構造からランダムコイル構造へ変形するなど、尿素は生物学の分野において非常に興味深い物質である。また、尿素は荷電子を多く持ち、親水基だけで構成される分子であるので、水と強力な水素結合を形成するなど、水溶液中において非常に興味深い性質を示す。

我々の研究室では、水溶液中での尿素的諸性質を解明するために、尿素水溶液の分子動力学シミュレーションを行ってきた。今回は、シミュレーション時間を増加させるとともに、水溶液中の尿素および水分子の構造的な特徴を解析した。

【分子モデル】

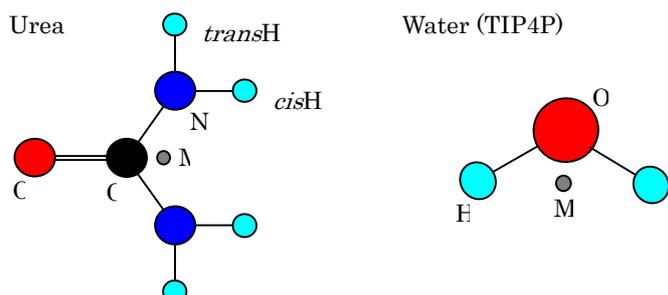


Fig.1. Molecular model of urea and water (M:center of mass)

シミュレーションで利用した尿素的分子モデルは、Caron らによる X 線結晶構造解析から得られた分子構造より決定した。また水の分子モデルは、現在最もよく用いられている TIP4P ポテンシャルを用いた。

【条件】

Table 1. Simulation systems.

System	Urea	Water	* Aqueous density (g/cm^3)
A	17	199	1.0571
B	30	186	1.0929
C	41	175	1.1163

*K.Kawahara, et. al J. Bio. Chem (1966)

(a)

水溶液中の尿素数変化による溶液構造の違いを解明するために、シミュレーションセル内の総分子数を 216 個とし、Table.1 に示す三種類の系 (System-A,B,C) で NVE アンサンブルを用いてシミュレーションを行った。濃度密度は実験値に合わせた。ステップ数については、以前のシミュレーションでは 10 万ステップ (40ps) しか行っていなかったが、今回は各系 500 万ステップ (2ns) 行った。

【結果・考察】

Fig.2.に尿素-尿素間の pair interaction distribution function (PIDF) を示す。

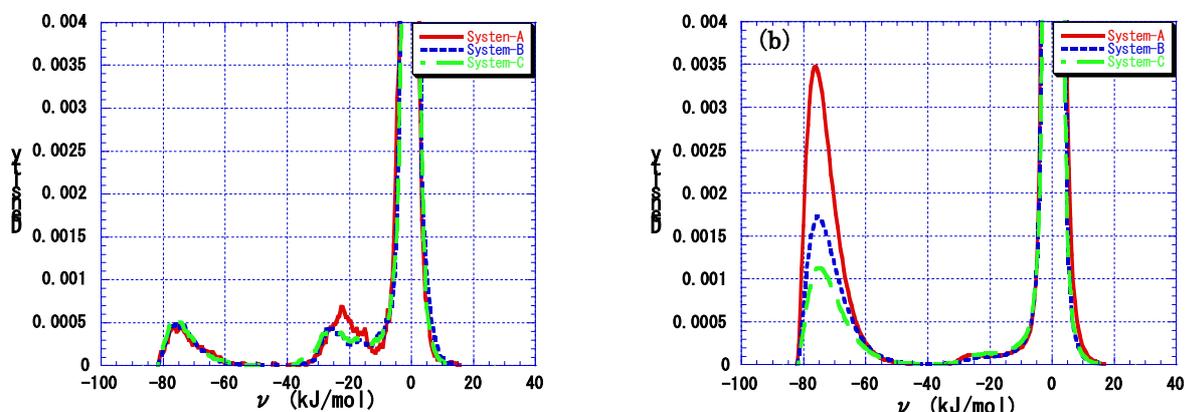


Fig.2. PIDF between urea-urea in aqueous solution of urea

(a) 100,000steps, (b) 5,000,000steps

グラフから、10 万ステップの場合には、尿素数を変化させても大きな差異は見られなかったが、500 万ステップの場合には、 $-80\text{kJ}/\text{mol}$ 付近のピークが顕著になっている。このピークから、尿素分子は cisH もしくは transH とほかの尿素分子の O 原子とで水素結合を形成し、二量体を形成していると考えられる。また、水溶液中の尿素濃度が低くなるに従ってピークが小さくなった。従って、水溶液中の尿素濃度が低いほうが、水溶液中で尿素二量体を形成する割合は高くなるということが考えられる。

また、水溶液中における尿素分子周辺のほかの尿素分子または水分子の構造的解析については当日発表する。

【参考文献】

K.Kawahara et al, J. Bio. Chem (1966)

H. Tanaka, H. Touhara, K. Nakanishi, and N. Watanabe, J. Chem. Phys. **80**, 5170 (1984)

H. Tanaka, K. Nakanishi, and H. Touhara, J. Chem. Phys. **82**, 5184 (1985)