

分子動力学法による尿素水溶液の構造に関する研究

○小林修、佐々和洋¹、林治尚²、中野英彦

兵庫県立大学大学院・工 (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)

¹姫路工業大学大学院・工 (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)²兵庫県立大学・学術総合情報センター (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)

【緒言】

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。実際に、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。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。

そこで本研究では、尿素水溶液の溶液構造や濃度依存性を解明するために、種々の条件下における分子動力学シミュレーション結果の比較を行った。

【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

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 (K.Kawahara, et. al J. Bio. Chem (1966)) に合わせた。

【結果】

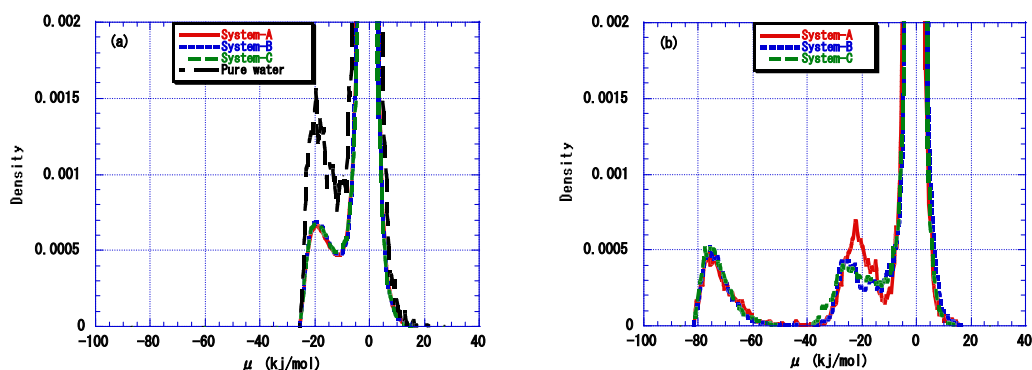


Figure.1 Comparison of pair interaction distribution:(a)water-water (b)urea-urea

これらの結果より、水溶液中において尿素分子は、尿素分子同士で強力な水素結合を形成し、ごく少数ではあるが二量体を形成すると考えられる。また水溶液中において水分子は、水分子同士で会合すると考えられ、純粋の系と比べて、その度合いに大きな減少が見られた。