

疎水性相互作用へのイオンによる影響の検討

○藤田貴敏¹、渡邊博文^{2,3}、田中成典^{1,2,3}¹神戸大学大学院総合人間科学研究科(〒657-8501 神戸市灘区鶴甲3-11)²神戸大学大学院自然科学研究科(〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1)³科学技術振興機構(JST) CREST

【緒言】

疎水性相互作用は水溶液中で非極性分子が会合しようとする相互作用であり、生体内において重要である。特にそのイオン依存性を評価することは、タンパク質や生体膜に与えるイオンの影響を論じる上で重要な視点である。ところが、分子レベルでのそのメカニズムについては未だ不明な点が多い。そこで本研究では、疎水性相互作用へのイオンによる影響を分子動力学シミュレーションにより検討する。

【方法】

疎水性相互作用のモデルとしてメタンの会合を扱い、イオンとしては塩化ナトリウム、塩化アンモニウム、塩化グアニジニウムを用いた。メタンの濃度は1.0Mに、イオンの濃度は2.0Mとした。

ポテンシャルとして、水はTIP3Pを、イオンはOPLSAAを、メタン分子はUnited AtomモデルであるGhoshら[1]のものを用いた。上述の系に対してソフトウェアTINKERを用いてMDシミュレーションを行った。NVTアンサンブルのもとで温度は300Kとした。

【結果】

MD計算から得られたそれぞれの系のメタン分子間の動径分布関数を右図に示す。塩化ナトリウムの系についての結果は当日報告する。塩化グアニジニウムがメタンの会合を著しく促進するのに対して塩化アンモニウムがメタンの会合をむしろ弱めていることが分かる。

発表では、これらの結果をより詳細に解析した結果について報告する。

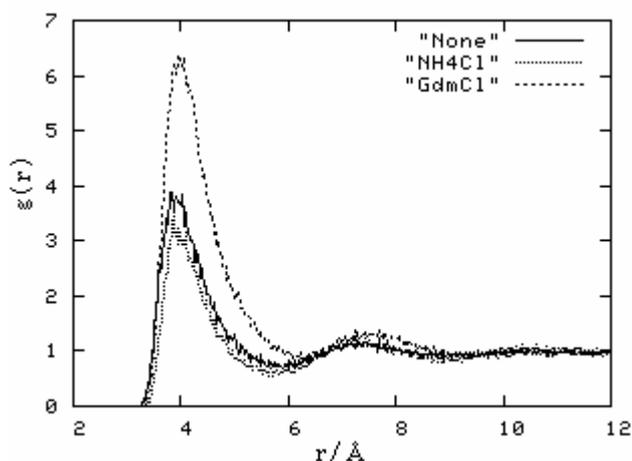


図:それぞれの系でのメタンの動径分布関数

【参考文献】

[1] T. Ghosh, A. Kalra, S. Garde, *J. Phys. Chem. B* 109, 642 (2005).