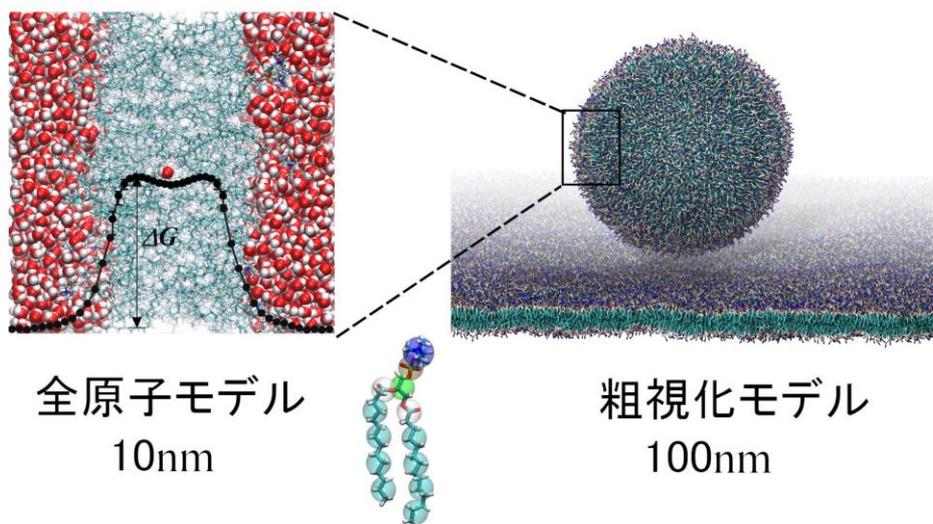


脂質自己集合構造の分子シミュレーション

篠田 渉

名古屋大学 大学院 工学研究科 (w.shinoda@apchem.nagoya-u.ac.jp)

脂質や界面活性剤のような両親媒性分子は溶媒中で様々な形態の自己組織化構造を形成する。特に脂質の作る二重層膜構造は、生体膜モデルとして長く研究されてきた。本講義では、自己組織化脂質膜系の分子動力学シミュレーション(MD)を用いた研究について、計算物質科学の観点から分子モデリングや計算の方法論の発展を中心に紹介する。前半は、全原子モデルに基づいた脂質二重層膜の MD を紹介する。境界条件や力場など、MD の基本事項を整理した後、分子の膜透過性の評価手法(自由エネルギー解析法)[1]について解説する。後半は、全原子モデルをリファレンスとする粗視化手法を概説し、分子集合構造形態の定量解析を可能とする粗視化分子モデルを用いた研究アプローチについて述べる。[2,3]いくつか適用研究例を紹介するとともに、マルチスケールの分子シミュレーションの利点について解説する。さらに時間が許せば連続体膜弾性理論との接合における課題について述べたい。



References

- [1] W. Shinoda et al., *J. Phys. Chem. B*, **108**, 9346 (2004); W. Shinoda, *BBA-Biomembranes*, submitted.
- [2] W. Shinoda et al., *J. Phys. Chem. B*, **114**, 6836 (2010); *Mol. Simul.* **33**, 27 (2007); *Soft Matter*, **4**, 2454(2008); *Soft Matter*, **7**, 9012 (2011); *Curr. Opin. Struct. Biol.* **22**, 175 (2012).
- [3] M. L. Klein and W. Shinoda, *Science*, **321**, 798 (2008).