

3P097

両親媒性を持つ有機分子の自己組織化および包接の分子動力学シミュレーション

(京都大院・理)○田中大地、内田芳裕、林重彦

Self-assembling of amphiphilic organic molecular and capsuling simulation

(Kyoto Univ.)○Daichi Tanaka, Yoshihiro Uchida, Shigehiko Hayashi

【序】

近年、水中で自己組織化するアントラセン環を含む両親媒性の有機分子が合成され、形成された自己組織化ミセル中に非水溶性の疎水性有機分子を包接することが観測された¹。このような自己組織化分子の包接により、従来出来なかった化学反応の実現などが期待される。しかし、このような包接については微視的な観測はされていないが、分子動力学計算により包接などの過程を見ていくことが可能である。しかし、このようなアントラセン環を含む分子(図 1)はアントラセン環とベンゼン環がビフェニル様に結合しており、 π 軌道共役と立体障害の打ち消し合いにより環の間の回転が緩いため、柔らかいと期待される。そのため、分子動力学計算で用いる分子内構造力場パラメータの決定に注意する必要がある。そのため、電子状態計算により構造力場パラメータの決定を行い、さらに決定したパラメータを用いて分子動力学計算を行い自己組織化の過程や包接の過程をシミュレートする。

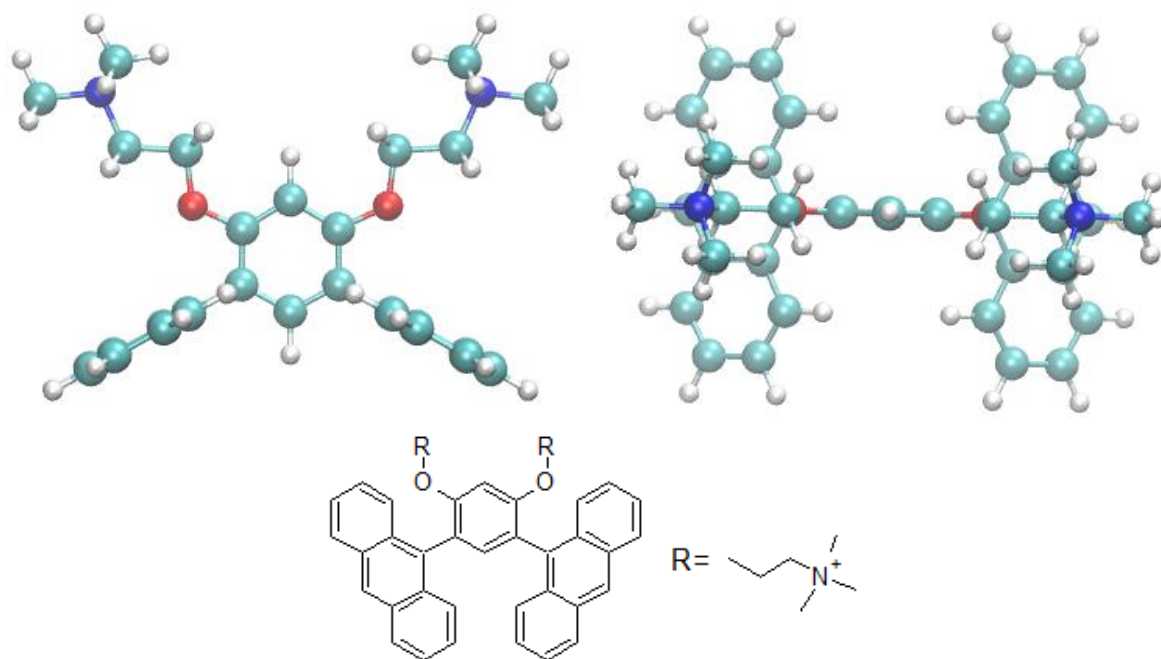


図 1. Overview and structural diagram

【計算方法】

(1) 構造力場パラメータ決定

アントラセン環とベンゼン環の結合部分での rocking 二つ、wagging 二つ、torsion 一つのパラメータの決定のため、図 1 の分子からニトロ基を含む側鎖を取り除いた分子(図 2)に対し電子状態計算を、密度汎関数 M06-2X を用いた DFT/6-31G*レベルによりエネルギー曲線を求めた。

¹ Kei Kondo, Akira Suzuki, Munetaka Akira, and Michio Yoshizawa, Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52, 2308

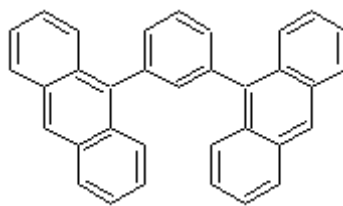


図 2. Overview and structural diagram

得られたエネルギーのグラフは下の通りである。

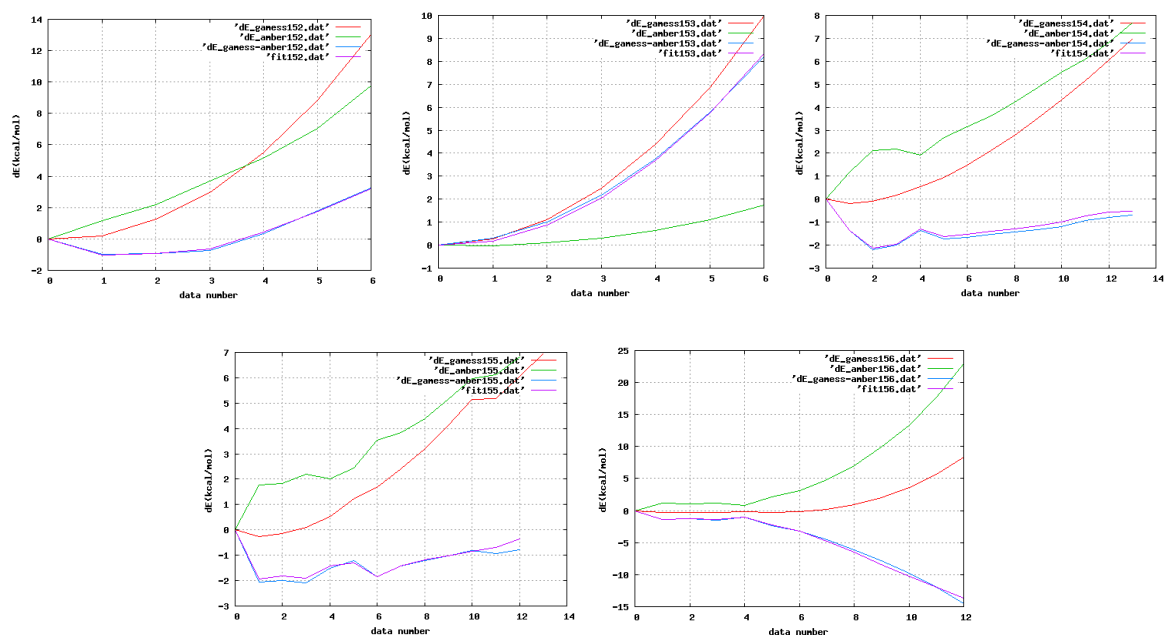


図 3. エネルギー図

これは、得られたエネルギー曲線(赤線)からフィッティングする自由度以外によるエネルギー(緑線)を引いたもの(式 1, 図 3 青線)を解析関数(式 2, 図 3 紫線)でフィッティングを行った。

$$E(\mathbf{R}_i) = E_{QM}(\mathbf{r}_i) - E_{MM}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i) \quad \dots (式 1)$$

$$\tilde{E}(\mathbf{R}_i) = \sum_{angles} K_{\theta} \Delta\theta^2 + \sum_{torsion} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] \quad \dots (式 2)$$

(2)分子動力学計算

計算条件の設計のために図 1 の分子を電子状態計算で構造最適化し、その構造から結合情報などを作った。上述のパラメータについてはここで変更を行った。これらの情報を用い分子動力学計算を行い自己組織化の過程を見ていくが、主に自己組織化する分子の数や構造などに注目する。例として下図(図 4)のように 4 分子での自己組織化が確認されている。

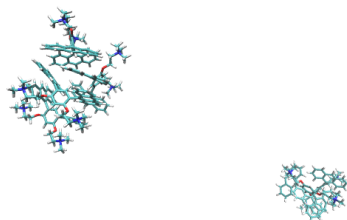


図 4. 図 1 の分子を 6 つ入れた系のスナップショット

計算方法の詳細や結果などは当日発表する。