## 自己組織化ナノキューブの粗視化モデル

(京大工\*,京大院工\*\*,京大 ESICB\*\*\*)〇吉田悠一郎\*,佐藤啓文\*\*,\*\*\*

## Coarse Grained Model for a Self-assembled Nanocube

(Faculty of Engineering, Kyoto University\*, Graduate School of Engineering, Kyoto University\*\*, Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, Kyoto University\*\*\*) O Yuichiro Yoshida\*, Hirofumi Sato\*\*, \*\*\*

【序】自己組織化とは、その構成要素から自発的に秩序を持った構造が作り出される現象のことであ り、そのメカニズムの理解は複雑系の科学において極めて重要な意義を持つ。

近年、平岡らによって見いだされた両 親媒性の歯車型分子(図1(a))は、互いに 噛み合って箱型の自己組織化体(図1(b)) を形成することが知られている[1]。この 系では、主に分子同士のファンデルワー ルス力が自己組織化体を安定化している ことが示されているが[2,3]、形成過程の 詳細については未だ明らかではない。本 研究では、この両親媒性分子の特徴を捉 えた粗視化モデルを提案し、モンテカル ロシミュレーションを通じて、その形成 過程の解明を目指す。



 $\boxtimes$  1 The structure of gear-shaped molecule and the nanocube

【モデル】Wales らによるウィルスカプシドの粗視化モデル [4] を参考に、図2に示す粗視化(Coarse Grained, (CG))モデルを開発した。このモデルは5つの相互作用点を有しており、2分子間の相互作 用ポテンシャル関数 *V<sub>ij</sub>* を次式のように定義する。

$$V_{ij} = V_{\text{apex}}(|\boldsymbol{a}_i - \boldsymbol{a}_j|) + \sum_{u=1}^{4} \sum_{\nu=1}^{4} V_{\text{M}}(|\boldsymbol{p}_i^u - \boldsymbol{p}_j^\nu|)$$
(1)

ここで $\mathbf{a}_i$ は分子iの頂点(図2の四角錐の頂点)、 $\mathbf{p}_i^1, \mathbf{p}_i^2, \mathbf{p}_i^3, \mathbf{p}_i^4$ は四角錐の底面の4つの頂点の座標 をそれぞれ表す。前者に関しては次式の斥力相互作用 $V_{\text{apex}}$ が働いている。

$$V_{\text{apex}}(|\boldsymbol{a}_i - \boldsymbol{a}_j|) = \epsilon_{\text{R}} \left(\frac{\sigma}{|\boldsymbol{a}_i - \boldsymbol{a}_j|}\right)^{12}$$
(2)

一方、後者の4つの頂点に関しては、モースポテンシャル関数 V<sub>M</sub>(r) を仮定し、引力が働く。

$$V_{\rm M}(r_{ij}) = \epsilon \left\{ e^{\rho(1 - \frac{r_{ij}}{r_e})} - 2 \right\} e^{\rho(1 - \frac{r_{ij}}{r_e})}, \quad r_{ij} = |\mathbf{p}_i^{\mu} - \mathbf{p}_j^{\nu}|$$
(3)

 $\epsilon$ および  $\epsilon_{\mathbf{R}}$ は相互作用の大きさ、 $\sigma$ は2項点間の斥力を特徴づける距離を、また  $r_e$  と $\rho$ はモースポ テンシャル関数のパラメータを表している。四角錐底面の中心から底面の頂点までの距離を  $r_b$ 、底面 から頂点までの高さを h とし、これらのパラメータを調整することで CG モデルを特徴づける。

この CG モデルから成る系に対して温度や密度の条件を様々に変化させながらモンテカルロ計算を 行い、自己組織化過程を追跡した。



 $\boxtimes$  2 (a), (b) Coarse grained model for the amphiphile molecule and (c) Morse potential ( $V_{\rm M}$ ) between base points (left) and repulsive potential  $V_{\rm apex}$  (right).

【結果】 $h = \frac{1}{\sqrt{2}}r_b$ 、 $\epsilon_R = \frac{1}{2}\epsilon$ 、  $r_e = 0.2r_b$ 、 $\rho = 3.25r_b$ 、 $\sigma = 2.82r_b$ の時に形成された箱形 構造ナノキューブを図 1(c) に 示す。このようにシミュレー ションに関わるパラメータを 適切に調整することで構造形 成が起こることが確認された。

図3は、6分子系モンテカル ロ計算のトラジェクトリーの 一例を示す。横軸はモンテカ ルロ法のステップ数、縦軸はエ ネルギーを示している。この 例では比較的少ないモンテカ



🗵 3 A trajectory of self-assembly process of the CG nanocube

ルロステップ数で速やかに箱形構造が形成されていることが分かる。一方で、一旦組み上がった構造 も熱エネルギー程度で揺らぐことがうかがえる。

計算の結果、構造形成は温度や密度など系のパラメータにも依存性を示し、条件によっては箱形以 外にシート型の構造も取りうることが分かった。当日はこれらとともに、形成過程の詳細についても 報告する。

【参考文献】

- Shuichi Hiraoka, Koji Harano, Motoo Shiro and Mitsuhiko Shionoya, J. Am. Chem. Soc., 130, 14368-14369 (2008).
- [2] Shuichi Hiraoka, Koji Harano, Takashi Nakamura, Motoo Shiro and Mitsuhiko Shionoya, Angew. Chem. Int. Ed., 48, 7006-7009, (2009).
- [3] Jun Koseki, Yukimi Kita, Shuichi Hiraoka, Umpei Nagashima and Masanori Tachikawa, *Theor. Chem. Acc.*, 130 1055-1059 (2011).
- [4] Iain G. Johnston, Ard A. Louis and Jonathan P. K. Doye, J. Phys. Condens. Matter, 22, 104101 (2010).
- [5] David J. Wales, Phil. Trans. R. Soc. A, 363 (2005).