4P021

シンプルモデルを用いた二次元系における巨大分子の拡散係数のシステムサイズ依存性

[1]九大院理
○長尾正明[1]，秋山良[1]

Basic Cell Size Dependence of Diffusion Coefficient for Macromolecule in a two-dimensional Lennard-Jones Fluid.

○Masaaki Nagao[1], Ryo Akiyama[1]
[1] *Department of Chemistry, Kyushu University, Japan*

【Abstract】
We examined basic cell size dependence of diffusion coefficient for macromolecule in a two-dimensional Lennard-Jones fluid by using molecular dynamics simulation. Diffusion coefficients for various macromolecule has been calculated. Those are not so easy because motion of macromolecule causes a flow of solvent molecules. The hydrodynamic effect is important in the calculation because this flow affects long range and the convergence of system size dependence is slow. Actually, the diffusion coefficient becomes larger as the basic cell size increases. In the present study, basic cell size dependence was analyzed for a two-dimensional simple model and we found appropriate scaling.

【序】
生体膜面上では、膜タンパク質が脂質二重層の間に浮かんでおり、膜面上を拡散している。この膜タンパク質は、様々な物質を運搬する役割を担っており、生体内で重要な働きをしている。ここでは、輸送係数の一つである巨大分子の拡散係数のシステムサイズ依存性について調べた。
しかし、分子動力学法を用いた拡散係数の計算には問題がある。分子動力学法を用いた溶媒分子の拡散係数の計算はこれまでに数多く行われてきたが、分子のサイズ比が異なる場合は流体力学効果により、拡散係数は実際の値より小さく見積もられてしまう。そこで、この課題を解決するために、線形化した流体の方程式と線形応答理論を用いた。[1]これは、三次元系で複数のシステムサイズにおいて拡散係数を求め、縦軸に拡散係数、横軸にシステムサイズの一辺の逆数を取り、外挿することで直線関係を得ることができるというものである。横軸の値が０のところではシステムサイズは無限大となり、無限系における拡散係数を直線の切片から求めることができる。今回我々は、巨大分子の拡散係数のシステムサイズ依存性を二次元のシンプルモデルを用いて確かめた。そして、三次元系におけるこの手法が、二次元系にも拡張することが可能か、分子動力学シミュレーションを行い確かめた。

【方法 (実験・理論)】
次のようなモデルを考えた。二次元系における液体の充填率(ϕ=0.45 程度)となるように円盤状小分子を配置し、1 分子だけ小分子の４倍の直径を持つ巨大分子を配置した。小分子間の相互作用には Lennard-Jones ポテンシャルを用い、巨大分子-小分子間の相互作用には Kihara ポテンシャル[2]を用いた。今回のシミュレーションのために二次

元系の分子動力学シミュレーションプログラムを作成した。速度 Verlet 法で時間積分を行い、温度は Nose-Hoover 法を用いて制御した。閉じた膜面は周期境界条件で模擬し、複数のシステムサイズでシミュレーションを行った。巨大分子の速度データより、速度−速度相関関数を求め、拡散係数を算出した。

【結果・考察】

以上のモデルを用いて、各システムサイズにおける速度−速度相関関数を求めるとFig.1 のようになった。拡散係数と速度−速度相関関数の関係は次の(1)式で結ばれる。

$$D_s = \frac{1}{3}\int_0^{\infty} < v_L(0) v_L(\infty) > dt \qquad (1)$$

この(1)式を用いて適当な値を時間積分の上端の値とし、区分求積法により拡散係数を求めた。縦軸に拡散係数、横軸にシステムサイズの一辺の逆数を取ることによってFig.2 を得た。このグラフで直線関係が得られたので、三次元系だけでなく、二次元系でも同様の手法が有効であると考えられる。細胞膜やオルガネラの膜は閉じた膜であり、その面積は $(100\mathrm{nm})^2$ ～$(10\,\mu\mathrm{m})^2$ 程度である。これは流体力学効果によって有限サイズ効果が重要になり始めると予想されるサイズである。このグラフからもそのことが予想される。

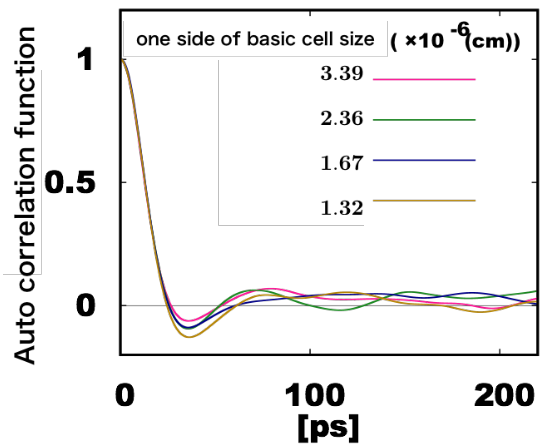

Fig.1 Auto correlation function of each basic cell size

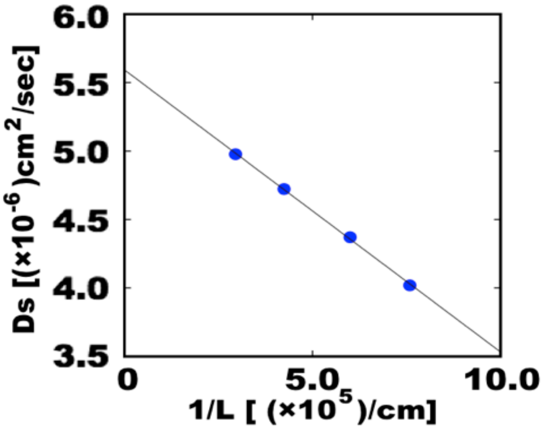

Fig.2 Diffusion coefficient of each basic cell size

【参考文献】

[1] M.Fushiki et al. System size dependence of the diffusion coefficient in a simple liquid Phys. Rev. E 68, 021203 ,2003

[2] Ken Tokunaga, and Ryo Akiyama Basic cell size dependence of displacement for a solvation motor in a Lennard-Jones solvent　J. Comp. Chem. Jpn., 17, 80–84 (2018)