

自己集合性ナノキューブの安定化と分子内包メカニズムの理論的研究

(横浜市大院生命ナノ¹・東大院総合文化²・横浜市大院 DS³) ○村田萌¹・陳弘燁²・小林理¹・島崎智実¹・平岡秀一²・立川仁典³

Theoretical Study on Self-assembled Nanocubes: Stabilization and Encapsulation Process of Guest Molecules (¹Graduate School of Science, Yokohama City University, ²Graduate School of Arts and Science, The University of Tokyo, ³Graduate School of Data Science, Yokohama City University) ○Moe Murata,¹ Hongye Chen,² Osamu Kobayashi,¹ Tomomi Shimazaki,¹ Shuichi Hiraoka,² Masanori Tachikawa³

Hiraoka and coworkers reported that six gear shaped amphiphile molecules (GSA 1^{12+}) form a cube-shaped hexamer, i.e. nanocube 1_6^{12+} , in water with high thermal stability. They also found that 2_6^{12+} , which lacks methyl groups in 1_6^{12+} , is less stable than 1_6^{12+} . We have carried out molecular dynamics (MD) simulations for nanocubes 1_6^{12+} , 2_6^{12+} , and 3_6^{12+} . Here, 3_6^{12+} has methyl groups only on the equator region in nanocube. The structure of 2_6^{12+} was deformed due to the large fluctuation, while those of 1_6^{12+} and 3_6^{12+} maintained cube-shaped structures. Our MD study clearly indicated that methyl groups on the equator crucially stabilize nanocubes.

Keywords : Molecular Dynamics, Self-assembly, Amphiphile

平岡らは歯車状両親媒性分子 (GSA 1^{12+}) 6 分子が水溶媒中で自己集合し、箱型構造の「ナノキューブ 1_6^{12+} 」を形成することを報告した (Fig. 1) ^{1,2}。また、平岡らはナノキューブ内の赤道部分 (Fig. 1 (b), 点線部) のメチル基を欠いた 2_6^{12+} が 1_6^{12+} と比べ不安定であることを明らかにしており²、これらのメチル基はナノキューブの安定化において重要である³。本研究では 1_6^{12+} , 2_6^{12+} に加え、赤道にメチル基が存在し、かつ極部分の構造が 2_6^{12+} と同等である 3_6^{12+} について分子動力学 (MD) シミュレーションを実行した。Fig.

2 に MD シミュレーションのスナップショットを示す。 1_6^{12+} , 3_6^{12+} は構造の揺らぎが小さくナノキューブが箱型構造を維持する傾向が見られた一方、 2_6^{12+} は揺らぎが大きくナノキューブの構造に歪みが見られた。したがって、極部分の構造はナノキューブ全体の安定性にほとんど影響しない一方で、赤道部分のメチル基はナノキューブ全体の安定化において重要であることが示唆された。

1) S. Hiraoka *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 14368-14369 (2008).

2) Y.-Y. Zhan *et al.*, *Commun. Chem.* **1**, 14 (2018).

3) J. Koseki *et al.*, *Theor. Chem. Acc.* **130**, 1055-1059 (2011).

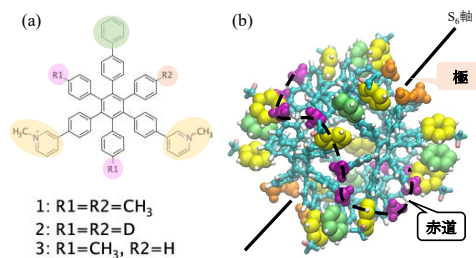


Fig. 1. (a) GSA (b) ナノキューブ 1_6

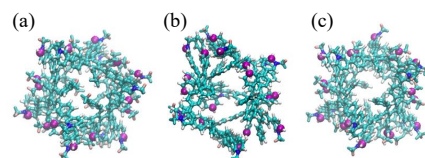


Fig. 2. MD シミュレーションのスナップショット

(a) 1_6 (b) 2_6 (c) 3_6