

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	馬淵 拓哉
研究機関名	東北大学
所属部署名	学際科学フロンティア研究所
役職名	助教
研究課題名	ナノ空間反応性イオン輸送制御システムの創出
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

**研究成果の概要**

本年度は、反応性プロトン輸送モデルの構築および粗視化 MD 法による高次構造解析モデルの構築を行った。反応性プロトン輸送モデルに関して、特に細胞内でも重要な役割を担っているプロトン ( $H^+$ ) の透過現象に着目した。プロトン輸送機構は「ビークル機構 ( $H_3O^+$  単体として移動)」と「ホッピング機構 ( $H_2O$  分子を媒介として移動)」の 2 種類に分類されるが、ホッピング機構は他のイオンには見られない化学反応を伴うプロトン特有の輸送機構のため、化学反応のより高精度な記述が可能である結合次数ポテンシャルを用いた ReaxFF モデルを新たに導入した。その結果、水溶液中におけるプロトン伝導の濃度依存性に関して実験値と良い一致を確認でき計算の妥当性を検証した。さらに、ビークル機構とホッピング機構の拡散係数への寄与度について塩濃度に係わらず一定の負の相関があることが示され、プロトン周りの溶媒和構造に起因してビークル機構とホッピング機構によるプロトンの移動方向が負の相関を持つことが要因であることが明らかとなった。

液-液相分離現象を再現するための粗視化 MD 法による高次構造解析モデルに関しては、一部の人工分子においては、粗視化 MD 法で用いる適切な相互作用パラメータが存在しないため、MARTINI カ場パラメータの決定方法に則り、全原子 MD 計算で得られた結果を利用して自由エネルギーの観点からボトムアップ的に複数の原子を 1 つの粗視化粒子として取り扱う粗視化モデルを構築した。人工分子の自由エネルギーを全原子 MD 計算により取得し、その結果を基に MARTINI カ場で予め定義されている複数の粗視化粒子モデルの中から一つを割り当てた。