

Title	吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討
Author(s)	鈴木, 哲夫
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2016), 2015: 49-49
Issue Date	2016-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/214367
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、吸着工学や乾燥工学などの種々のプロセスに関連する物理化学的な諸問題を取り上げ、分子軌道法や分子動力学法などの計算機化学的手法を用いて検討を行うことを目的としている。今年度はアガロオリゴ糖の水和状態を分子動力学(MD)シミュレーションにより検討した。以下その概要を報告する。

糖鎖高分子であるアガロースは、寒天の主要成分であり、食品や電気泳動用支持体に用いられている。そのアガロースを低分子化して得られるアガロオリゴ糖は、抗炎症作用、発がん予防作用などの固有の性質が報告されており、機能性食品への応用が期待されるユニークなオリゴ糖である。本研究では、食品工学、生化学などで有用な基礎的知見を得ることを目的として、分子動力学(MD)計算を用いたアガロオリゴ糖の水和状態に関する研究を行った。アガロースの凝固過程では、アガロース鎖が2重らせんを形成することが知られている。そこで、アガロオリゴ糖が同様の会合状態を形成するか否かについて検討した。

残基数6のアガロオリゴ糖に着目し、1本の糖鎖が単独で水和している構造1、ならびに2本の糖鎖が会合して水和する構造2、の2種類の構造を取り上げた。これらの水和状態について、Amber 14プログラムを用いてMD計算を実施した。分子力場はアガロオリゴ糖にはGAFF、水分子にはTIP3Pを適用した。オリゴ糖の質量濃度が0.6, 3.0, 5.7, 8.3 wt%の各水溶液について、5, 25, 50, 75°Cの各温度条件に対するシミュレーションを実行した。NPTアンサンブルによる熱平衡計算後、NVTアンサンブルで1 nsのMD計算を行った。構造1および2の水和の自由エネルギー A について、構造1の水和状態を基準としたエネルギー差 ΔA を求めた。

計算結果より、アガロオリゴ糖の会合状態は2重らせん構造を含め、様々に形状が経時変化することがわかった。 ΔA の糖濃度依存性を調べたところ、0.6 wt%の場合はいずれの温度においても ΔA はほとんど0であった。すなわち、この濃度では糖鎖が会合せずに水和している状態と、会合している状態とがほぼ同程度に起こりうると考えられる。一方、糖濃度が3.0, 5.7, 8.3 wt%の場合、 ΔA は負となった。この結果は、糖鎖が単独で水和する構造1よりも、2本の糖鎖が会合する構造2の方が自由エネルギー的に有利であることを示している。さらに、いずれの温度においても、糖濃度3.0 wt%または5.7 wt%において ΔA が極小値をとることがわかった。なお、糖濃度が3.0, 5.7, 8.3 wt%の場合の ΔA の温度依存性については、高温になるにつれて ΔA が増加($\Delta A < 0$ で絶対値が減少)した。これは、温度上昇に伴い糖鎖や水の熱運動が激しくなることで、2本の糖鎖が会合し続けるのが自由エネルギー的に不利になることを示している。