

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。特に、糖鎖の水和状態に及ぼす共存成分の影響の検討例として、NaCl イオンが共存する場合の水和状態を調べた。

MD 計算には Amber 14 を用いた。糖残基数 6 のアガロオリゴ糖を取り上げ、糖鎖 1, 2 本、糖鎖の質量濃度 0.6, 5.7 wt%、NaCl の質量濃度 0, 1.1 wt%、の各場合について、NPT アンサンブル (1 atm, 25°C, 75°C) の MD 計算を実施した。なお糖鎖 2 本の系では、糖濃度 0.6, 5.7 wt%の各場合に糖鎖がそれぞれ 40 Å, 20 Å 離れて独立に水和した状態を初期配置とした。2 本の糖鎖の会合状態について、糖鎖間距離 D [Å] や 2 本の糖鎖がなす角度 θ [deg]などを求めた。さらに、各条件下において 2 本の糖鎖がなす構造について、2 重らせん構造からの乖離しやすさを検討した。

2 本の糖鎖は初期配置では独立に水和していても、NaCl イオンの有無によらず会合し、会合に要する時間もイオンの有無には依存しなかった。一方、2 本の糖鎖がなす角 θ の経時変化を調べたところ、会合後は糖鎖の動きが抑制されるため、例えば約 150° を中心として 120° から 180° の間で θ の値が振動するが、数 ns から数十 ns の時間スケールで大幅な構造変化が生じて 2 本の糖鎖の向きが最初の会合状態から完全に反転することがあり、その場合例えば θ の値が約 150° を中心とした振動から約 30° を中心とした振動へと大幅に変化する場合があった。このような大幅な変化が生じる回数は NaCl 濃度 0 wt%の系の方が 1.1 wt%の系よりも多かった。さらに、会合後の経過時間に対して、2 本の糖鎖がなす構造が 2 重らせん構造から大幅に乖離した延べ時間の割合(乖離率)を求めると、NaCl 濃度 1.1 wt%の方が 0 wt%に比べて小さくなった。これより NaCl イオンが共存する方が糖鎖が乖離しにくいと考えられる。