

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、乾燥工学、食品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、MD 計算を用いてアガロオリゴ糖の水和状態を調べた。比較のため、二糖類のマルトースとトレハロースについても同様の計算を実施した。

MD 計算には Amber18 を用いた。糖残基数 2 のアガロオリゴ糖と、マルトース、トレハロースについて、糖 18 個、濃度 0.3, 0.6, 1.8 wt% の場合を取り上げた。基本セルに配置した水分子の個数は、濃度 0.3, 0.6, 1.8 wt% に対してそれぞれ 102600 個、51300 個、17100 個だった。それらの基本セルを用いて、圧力 1 atm、温度 25, 50, 75°C の NPT アンサンブル MD 計算を行った。18 個の糖の会合状態について、任意の 2 つの糖の重心間距離などを調べ、糖の動的挙動について検討した。

検討例として、100 ns の期間において、水中に形成される糖クラスターに含まれる糖の個数(会合数)について調べた結果を述べる。なお 2 つの糖の重心間距離が 8 Å 以下である場合、それら 2 つは会合しているとみなして会合数を推算した。

アガロオリゴ糖濃度が 1.8 wt% の場合について、会合数の温度依存性を調べたところ、25°C ではほぼ常に会合数 18 個のクラスターが 1 個だけ形成されているが、温度が高くなるにつれて会合数が 17 個以下のクラスターが形成されるようになった。次に、25°C におけるアガロオリゴ糖の会合数の濃度依存性を調べたところ、濃度が低くなるにつれて会合数が減少し、特に 0.3 wt% では会合数 18 個のクラスターはほとんど形成されなかった。他の糖についても同様の温度依存性や濃度依存性が得られたが、糖による会合しやすさには違いがみられた。具体的には、アガロオリゴ糖は他の糖に比べ小さなクラスターを形成しやすかった。このような差が生じたのは、トレハロースとマルトースの OH 基の数は 8 個であるのに対し、アガロオリゴ糖の OH 基の数は 6 個で、他の糖より 2 個少ないことが大きく影響したと考えられる。