

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科学的手法を用いて検討を行うことを目的としている。今年度はトレハロースの水和状態を分子動力学(MD)計算により検討した。以下その概要を報告する。

二糖の1種であるトレハロースは、2つのD-グルコースが1,1-結合した非還元糖である。でんぷんの老化防止作用や保湿作用があることから、食品や化粧品などの添加剤として多用されている。また、タンパク質の凍結や凍結乾燥時の保護作用などについて、様々な研究報告がなされている。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計算によりトレハロースの水和状態を調べた。

MD計算のプログラムはAmber18を用いた。トレハロース濃度が0.3, 0.7, 2.0 wt%の水溶液のモデルとして、シミュレーションの基本セルにトレハロース分子36個と、水分子をそれぞれ205200個、102600個、34200個配置したものを作成した。それらのモデルを用いて、圧力1 atm、温度0 °Cの条件で、シミュレーション時間600 nsのNPTアンサンブルMD計算を実施した。得られた計算結果を用いて、水中における36個のトレハロースの動的挙動について調べた。特に、トレハロースが形成するクラスターに着目して検討した。以下、その概要について報告する。

MD計算より、いずれの濃度においても、複数のトレハロースが会合してクラスターを形成することが示唆された。そこで、シミュレーション時間が300 nsから600 nsまでの300 nsの期間において、トレハロースが形成するクラスターのサイズを調べた。ここで、クラスターのサイズはトレハロース分子の会合数により評価した。なお、会合数の算出においては、任意の2つのトレハロース分子について、互いの重心間距離が9.5 Å以下であれば、それらは会合していると判定した。

上記のような評価に基づき、300 nsの期間にトレハロースが各サイズのクラスターを形成する、平均形成時間を求めた。その結果、トレハロース濃度が0.3 wt%の場合、主にトレハロース分子が12個会合したものと21個集まったものの2個のクラスターが生じた。それらの平均形成時間はそれぞれ60 nsおよび70 ns程度だった。0.7 wt%の場合は、トレハロース分子が34-36個集まったクラスターが1個生じた。それらの平均形成時間は、34個および35個がいずれも100 ns程度、36個が80 ns程度だった。濃度が2.0 wt%の場合は、300 nsのほぼ全期間において、トレハロース分子が36個集まったクラスターが1個生じた。