

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計算により水溶液凍結時の氷晶成長に伴うトレハロースの濃縮過程を調べた。

MD計算のプログラムはAmber18を用いた。1440個の水分子からなる約 $44\text{\AA}\times 44\text{\AA}\times 24\text{\AA}$ の大きさの氷(I_h相)の結晶の分子モデルを作成した。その氷晶をMD計算の基本セルの中央に配置し、周囲にトレハロース分子100個、水分子3800個からなる濃度33 wt%のトレハロース水溶液を配置した。得られた基本セルの大きさは約 $44\text{\AA}\times 44\text{\AA}\times 100\text{\AA}$ となった。このモデルに3次元周期境界条件を適用し、1 bar、-30 °CのNPTアンサンブルMD計算を実行した。熱平衡計算後の500 ns間において、氷晶の成長、およびそれに伴うトレハロースの凝集過程について検討した。

基本セル内で氷晶が成長し、トレハロースが凍結濃縮される様子を可視化プログラムVMDを用いて観察した。時間が進むにつれて、トレハロース水溶液中の水分子の一部が凍結し、氷晶が成長することが確認できた。この氷晶の成長に伴い、500 nsにおいてはトレハロース水溶液が44 wt%まで濃縮されたことがわかった。

また、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、濃度33 wt%(シミュレーション時間:10 ns)のときと、44 wt%(シミュレーション時間:500 ns)のときについて、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9.0 Å以下であれば、それらは会合していると判定した。

33 wt%では、クラスターを構成するトレハロース分子数は最大10分子程度で、数種のサイズのクラスターが同程度の割合で存在した。濃縮が44 wt%まで進むと、それらのクラスターが凝集してより巨大なクラスターを形成し、56分子で構成された紐状のクラスターが生じた。