

セルロース微結晶の分散液中における構造  
Structure of cellulose microcrystals in dispersion

京都大学大学院 農学研究科 森林科学専攻 小林 加代子

研究成果概要

セルロース微結晶の表面に特定の官能基を導入すると、形状が変化することや、高分子に対する核剤性能が向上することがわかっている。しかしながら、そのメカニズムについては不明である。また、一般的に電子顕微鏡や原子間力顕微鏡などで観察される微結晶は乾燥状態であり、分散液中でどのような状態にあるかは不明な点が多い。そこで本研究では分子動力学(MD)計算を用いて、分散液中でセルロース微結晶かどのような状態にあるか、表面構造によってそれがどのように異なるかを調べることを目的としている。

今年度は、Materials Studio 2021 HF1 を用いて、グルコシドの一種であるサリシンをセルロース分子鎖の末端に導入した微結晶の分子動力学計算を行い、その結晶形状の変化を追跡した。はじめに、サリシンを末端に有するセルロース分子鎖 200 本の II 型結晶モデルを、結晶作成ツールと Supercell による拡張機能を用いて作成した。そして、結晶の構造最適化を行った後、分子動力学法によるシミュレーションを行った。シミュレーションの結果、結晶表面に導入した芳香環上の置換基のプロトンと  $\beta$  結合するグルコース残基の酸素原子が新たに水素結合を形成しうること、グルコースと芳香環の  $\beta$  結合と芳香環がなす二面角や結合長が、大きく変化しうるということがわかった。これまでの観察において、結晶は水中でらせん形状に変形することが分かっているため、今後は、分散液中の条件を再現することや、計算条件を変化させることによって、結晶の変形要因を解明したいと考えている。