

ジペプチド保護体の CO₂ 吸着状態の解析
Analysis of the CO₂ sorption state of protected dipeptide

京都大学 大学院人間・環境学研究科 関連環境学専攻 分子・生命環境論講座
津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端を保護した BocGly-L-Phe（以下、**1** と略記。図1）の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。また、**1** の結晶が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い（図2）、結晶を構成する**1**と結晶中に吸着された二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の解析を行った結果、**1** と二酸化炭素との間には主として分散力が働いていることが判明している。

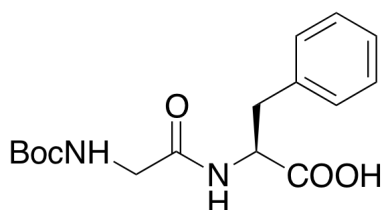


図1 **1** の分子構造

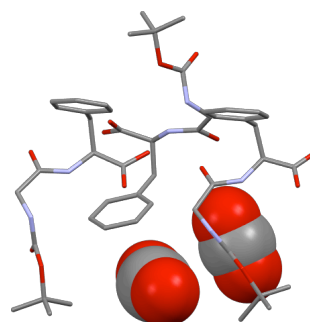


図2 **1** の CO₂ 吸着状態

本研究では、**1** が示す二酸化炭素に対する親和性をより詳細に解明することを目的として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを用いて、**1** と二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の再解析を行った。

具体的には、結晶中で二酸化炭素とその周辺に存在する計八分子の **1** との分子間相互作用を解析した。計算化学アプリケーション Materials Studio の DMol³ を用いて、二酸化炭素の吸着状態の結晶構造を最適化し、次いで Gaussian 09 を用いた MP2 レベルでの一点計算を行った後、GDMA と Orient を用いたエネルギー分割計算を行った。その結果、二酸化炭素と **1** との分子間相互作用には、軌道の重なりが主たる要因となる短距離力とクーロン力が要因となる長距離力が関与しており、前者は斥力として働いている一方、後者は引力として働いていることが明らかとなった。