

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、吸着工学や乾燥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、分子動力学(MD)計算を用いたアガロオリゴ糖の水和状態に関する研究を行った。アガロースの凝固過程では、アガロース鎖が 2 重らせんを形成することが知られている。そこで、アガロオリゴ糖が同様の会合状態を形成するか否かについて検討した。

糖残基数 6 のアガロオリゴ糖を取り上げ、複数の糖鎖が存在する場合の動的挙動について、Amber 14 プログラムを用いて検討した。分子力場はアガロオリゴ糖には GAFF、水分子には TIP3P を適用した。1つのセル内に糖鎖が1～4本存在する場合について、1 atm、糖鎖の質量濃度が 0.6, 5.7 wt%、温度が 25, 75℃の各条件における 100 ns の NPT アンサンブル MD 計算を実施し、糖鎖長 L [Å]や糖鎖間距離 D [Å]などを求め、アガロオリゴ糖の水中における動的挙動を調べた。

計算結果から、複数のアガロオリゴ糖が会合し得ることがわかった。また、経時変化に伴う糖鎖長 L の分布を求めたところ、会合の有無・濃度・温度によらず概ね平均長約 26 Å の χ^2 分布となることがわかった。

次に、アガロオリゴ糖の糖鎖数 2 本、濃度 5.7 wt%、温度 25℃の条件における MD 計算結果から、二重らせん構造形成について検討した結果の概要を記述する。糖鎖の動的挙動の検討結果から、二重らせん構造となる場合の要件の一つは、糖鎖間距離 D の値が 7 Å 程度以下であることがわかった。今回の 100 ns の計算結果では、2本の糖鎖は初期配置においては約 30 Å 離れているが、約 2 ns で D が 7 Å 程度以下という要件を満たした。さらに、アガロースの結晶構造から得られた二重らせん構造内の原子間の位置関係と、MD 計算で得られたアガロオリゴ糖内の原子間の位置関係を比較したときの一致率の経時変化を調べた。その結果、7-12 ns および 13-17ns の期間に 75 %以上の高い一致率を示した。即ち、これらの期間においては二重らせん構造を形成していると言える。