

トリアシルグリセロールのグリセロール骨格コンフォメーションの振動スペクトルへの影響

Influence of glycerol conformation in triacylglycerol on vibrational spectra

大阪大学 理学研究科 高分子科学専攻

武智 恭世

研究成果概要

目的: 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、トリアシルグリセロールのグリセロール骨格部分のコンフォメーションの違いが、赤外吸収スペクトルにどのように反映されるかについて検討した。

計算: 量子化学計算プログラム(Gaussian 16)を用いて、密度汎関数法を用いた第一原理計算を行った。基底関数は 6-31G (d,p)である。トリアシルグリセロールには、3 分子のパルミチン酸と 1 分子のグリセロールから構成されるトリパルミチンを選び、グリセロール骨格に起因する赤外吸収スペクトルの変化を求めた。

結果: トリパルミチンは、結晶化条件の違いにより準安定相 α 、 β' と安定相 β と呼ばれる結晶多型を示す。結晶多型の違いにより、アルキル鎖のパッキングやグリセロール骨格部分のコンフォメーションが変化することが、XRD や赤外スペクトルの実験結果からは示されている。

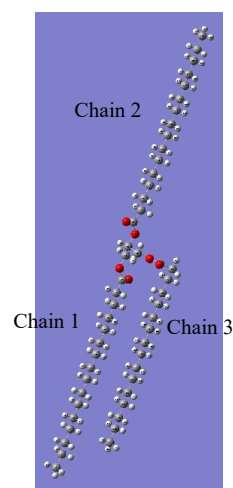


Figure 1 β 相の分子鎖構造

特に本計算で注目するグリセロール骨格は、安定相 β では左図 1 のような伸びきり鎖(Chain 1 と 2)と折れ曲がり鎖(Chain 3)からなる椅子型構造と呼ばれる構造をとり、赤外スペクトルでは $\text{C}=\text{O}$ 伸縮振動が 1738cm^{-1} (伸びきり鎖: Chain 1 と 2)と 1728cm^{-1} (折れ曲がり鎖: Chain 3) にそれぞれ出ることが確認されている。一方、融液の急冷固化で生じる準安定 α 相は、グリセロール骨格付近に乱れを含みすべてが伸びきり鎖からなる音叉型構造をとることがわかっている。その場合、赤外 $\text{C}=\text{O}$ 伸縮バンドは折れ曲がり鎖に起因したバンドは消失し、伸びきり鎖に起因したブロードバンドが 1739cm^{-1} に観測される。このようなスペクトルの特徴が基準振動計算でも現れたので結果を図 2 に示す。 β 相では、伸びきり鎖と折れ曲がり鎖に起因するバンドが 1751cm^{-1} (補正無し: 1816cm^{-1})と 1742cm^{-1} (補正無し: 1807cm^{-1})に、 α 相では伸びきり鎖に起因した一本のブロードなバンドが 1759cm^{-1} (補正無し: 1824cm^{-1})に現れ、実測の IR と同様な傾向が確認された。

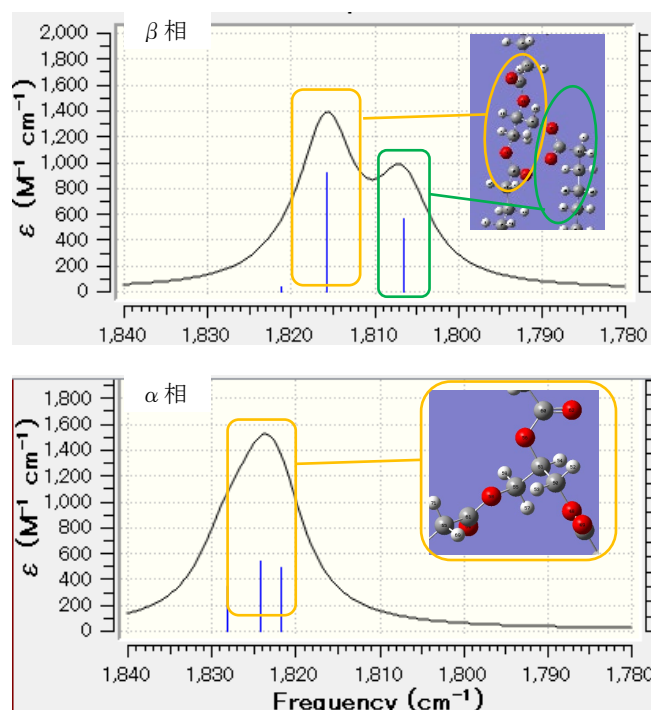


Figure 2 グリセロール $\text{C}=\text{O}$ 伸縮バンド (補正なし)