

生体高分子の分子シミュレーション
Molecular simulation of biopolymers

京都大学生存圏研究所生物機能材料分野 田中文男

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、高等植物体中に存在する天然高分子であるセルロースを初めとする多糖、及びそれらの多糖の様々な誘導体の構造最適化、並びにそれらの構造から予測される特性を体系的に調べることを目的としている。

本年度は、セルロース系材料の熱分解安定性を改善するためには、どのような官能基を導入するのが良いかを調べるために、グルコースとセロビオース及びそれらの誘導体をモデルとして、非経験的計算法により、熱分解過程の素反応の解析と律速過程のエネルギーバリアーを算出し、何れの官能基を導入した場合に最も安定性が改善されるかを予測した。

検討するモデル分子としては、オリジナルのグルコース、セロビオース及びそれらの分子の水酸基を、アセチル基、ピバロイル基、ベンゾイル基で置換した誘導体を用いた。グルコース、及びセロビオースの還元末端のアノマー炭素に付く官能基については、 α 一位、 β 一位の両方について検討した。またグルコサン構造の生成についても、 α -グルコサン、 β -グルコサン(レボグルコサン)の両方の構造について検討した。

それぞれの分子の熱分解によるグルコサン生成反応の遷移状態探索、活性化エネルギー算出の結果、グルコース及びその誘導体で行った解析で得られた値からは、 β -アノマーからレボグルコサンが生成する場合のピバロイル誘導体、ベンゾイル誘導体が最も活性化エネルギーの値が高く、熱分解安定性が最も向上していることが分かった。 α -グルコサンを生成する反応や、アセチル誘導体からレボグルコサンを生成する反応は何れも活性化エネルギーの値はやや低く、特に、グルコースにアセチル基を導入した時には、オリジナルのグルコースの場合に比べ熱分解安定性はほとんど向上していないことが分かった。

セロビオースの場合については、現時点では、還元末端が β -アノマーのセロビオース、及びそのアセチル誘導体についての結果までしか確認できていないが、やはりアセチル誘導体では熱分解安定性は改善できないようであった。

以上のことからセルロース系分子にピバロイル基、あるいはベンゾイル基のような官能基を導入することにより、熱分解安定性を改善できる可能性に期待が持てた。

今後の予定としては、残りの解析を更に進めるとともに、これらの官能基の導入により、何故、熱分解安定性が向上するのか、その理由についても検討する予定である。

発表論文(謝辞あり)

田中文男; 2015 *Cellulose R & D*, p.24 (2015).