

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 生物繊維学分野 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、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、昨年度の計算結果を論文に投稿するため、データの整理や再計算などを実施した。従って、内容は昨年度と同様であり概要は以下の通りである。

グリコシドの一種であるサリシンを表面に有するセルロースの結晶を作成し、その結晶を水中に設置したモデルを用いて、Amber24 による分子動力学計算を行った。そして、未修飾のセルロース II 型結晶のシミュレーションと比較することにより、表面官能基の存在が結晶に与える影響を調べた。シミュレーションの結果、II 型結晶では、わずかな原子配置の違いから、結晶に表裏が存在しうることが分かった。またサリシンを結晶表面に有する結晶においては、芳香環が結晶の板状面と平行になる様子がみられた。Amber の付属ツールによる解析を進めた結果、芳香環が板状面と平行であるとき、結晶の片面にのみ、未修飾の II 型結晶ではみられなかった 2 つの水素結合が新たに形成されていた。これまでに、サリシンを結晶表面に導入すると、結晶が左巻きのらせん状に変形する様子が実験的に観察されている。らせん変形には特定の方向に特定の力が働く必要があるが、本シミュレーションにおいて形成が確認された水素結合は、結晶が左巻きらせんを形成するのに必要な応力の方向と一致した。