

無水キトサン結晶の熱挙動解析

Thermal Behavior Analysis of Anhydrous Chitosan

京都大学 農学研究科 森林科学専攻 生物繊維学分野 大川一路

研究成果概要

キチンは N-アセチル-D-グルコサミンが β -1,4-グリコシド結合した直鎖状の高分子であり、甲殻類や昆虫の外骨格、菌類の細胞壁などに天然では存在する。キチンをアルカリ処理により脱アセチル化するとキトサン(ポリ- β 1,4-グルコサミン)を調製することができる。キトサンはアミノ基を有しているために、抗菌活性、生理活性を有しており、バイオメディカル分野での応用が期待されている。また、ポリプロピレンなどの高分子との複合材料化に関する研究も行われているが¹⁾、一般的に複合材料では高分子材料のマトリックスとフィラーの熱膨張率の違いから内部応力が発生することが報告されている。このような問題が存在するにも関わらず、キトサンの熱膨張挙動は未だ明らかではない。そこで、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、分子動力学法(MD)を用いて無水キトサン結晶の熱挙動挙動について解析を行うこととした。

Naito らによって報告されている無水キトサンの結晶構造により²⁾、分子モデルを作成した。分子モデルは周期境界条件を利用した無限結晶モデルとした。結晶モデルは、グルコサミン残基 8 個で構成された分子鎖が、*a* 軸方向に 4 本、*b* 軸方向に 8 本の合計 32 本の結晶モデルを構築し、一辺が約 4 nm のシミュレーションボックスに充填した。

力場は 56Acarbo をもとに³⁾、Naumov と Ignatov によりキトサン・キチン用に改良された力場を用いた⁴⁾。NPT アンサンブルで 0 K から 600 K まで昇温させた結果、無水キトサン結晶モデルは異方性の熱膨張挙動を示した。分子鎖軸方向にはほとんど熱膨張しないが、分子鎖垂直(*b* 軸)方向へは大きく熱膨張した。これは、各軸に対する結合種の違いが影響していると考えられる。今後は、各軸の結合強さと熱膨張の挙動の関係について明らかにする予定である。

【文献】

- 1) Jangong, O. S., et al. *Journal of Physics: Conference Series*, 1341, 082022, (2019).
- 2) Naito, P. K., Ogawa, Y., Sawada, D., Nishiyama, Y., Iwata, T., and Wada, M. *Biopolymers*, **105**, 361-368, (2016).
- 3) Hansen, H. S., and Hünenberger, P. H. *Journal of computational chemistry*, **32**, 998-1032, (2011).
- 4) Naumov, V. S., and Ignatov, S. K. *Journal of Molecular Modeling*, **23**, 1-15, (2017).