

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 鈴木哲夫

<背景と目的>

本研究課題では、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。今年度はガラス状態の糖（糖ガラス）中における水分子の動的挙動について分子動力学（MD）シミュレーションにより検討したので、以下その概要を報告する。

食品や医薬品の中には、糖類添加により生じる高粘度状態あるいはガラス状態を利用して、香気成分や品質を保持するものが多数存在する。しかしながら、水分子や糖類の動的挙動が保持作用に及ぼす影響などの微視的な知見は十分には得られていない。そこで、本研究では MD シミュレーションを用いて、糖ガラス中における水分子の動的挙動に関する検討を行った。

<検討内容>

単糖類である α -グルコースについて、そのガラス状態を MD シミュレーションにより解析した。計算には Accelrys 社の Materials Studio を用いた。分子力場には DREIDING 力場と、水同士の相互作用を適切に表現する TIP3P 力場を組み合わせ使用した。NPT アンサンブルで数種の温度に対してシミュレーションを行った。時間の刻み幅は 1 fs に設定し、10 万ステップ（100 ps）の熱平衡計算の後、さらに 10 万ステップ超の計算を実施して水分子の双極子自己相関関数（DACF）ならびに回転緩和時間 τ などを求め、動的挙動を考察した。

<結果及び考察>

α -グルコース濃度が 70-98wt% の各濃度について、おのおの数種類の温度に対して MD シミュレーションを実施し、水分子の DACF から τ を求めた。得られた τ を絶対温度の逆数に対して片対数プロットした。95wt% の場合のプロット例を図 1 に示す。高温の 7 つのデータと低温の 3 つのデータがそれぞれ異なる直線上にならんでいることがわかる。双方の直線が交わる温度を求めると -0.6°C となり、ガラス転移温度 T_g の実験値（T. R. Noel, et. al., *Carbohydr. Res.*, **282** (1996) 193-206）と概ね一致する値となった。これより、 τ の絶対温度依存性に着目することで、 T_g を推算可能であると考えられる。そこで、70、92、94、96、98wt% の各濃度についても同様の手順で T_g を推算したところ、いずれの濃度においても概ね実験値と一致する結果が得られた。以上より、水分子の DACF を用いた解析は、 T_g を推算する上で有用であると考えられる。

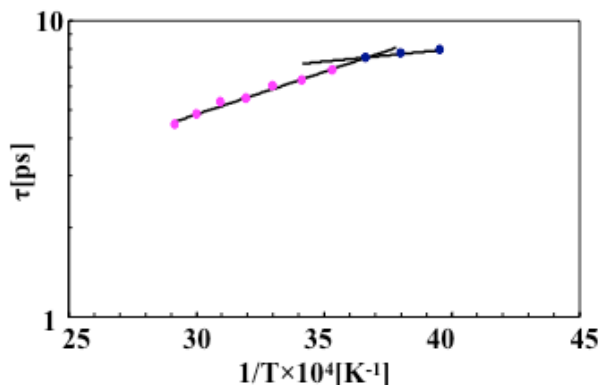


図 1 回転緩和時間 τ の絶対温度依存性