

修飾シクロデキストリンの包接化合物形成

山口大院創成科学 下柘晴菜・浦上直人・山本隆

【はじめに】

修飾デキストリンなどの環状分子に鎖状分子が結合した分子は、鎖状部分が環状内に入ることで包接化合物を形成する。このような包接化合物は超分子デイジーチェーンと呼ばれ、環状分子と鎖状分子が結合していない場合に観察される包接化合物に比べ、複雑で多様な包接化合物の構造を形成することが知られている。そのため、超分子デイジーチェーンは新たな機能性デバイスへの利用が期待されており、その複雑な構造形成のメカニズムを調べることは重要である。そこで本研究では、ブラウン動力学シミュレーションを行うことで、修飾シクロデキストリン (mCD) による超分子デイジーチェーンの構造形成のメカニズムを調べることを目的とした。

【シミュレーション方法】

本研究では、 α -CD の粗視化モデル¹⁾を改良し、mCD モデルを構築した。環状部分は 24 粒子で粗視化し、内側に疎水性粒子、外側に親水性粒子を配置することで、CD 内外の親水性・疎水性の違いをあらわした。また、修飾部分の高分子鎖は疎水性粒子のみを持つ鎖状分子として扱った。修飾部分の鎖状分子の長さ違いによる包接化合物の構造形成への影響を調べるため、鎖状部分のモノマー数が異なる mCD を用意し、OCTA の COGNAC²⁾を用いシミュレーションを行った。

【結果と考察】

20 分子の mCD でシミュレーションをすることで得られた特徴的な包接化合物を Fig. 1 に示す。修飾部分が他の mCD に包接した線状包接化合物(Fig. 1(a))や環状包接化合物(Fig. 1(b))を得た。さらに、修飾部分の鎖長が長くなると、鎖状部分に 2 つ以上の mCD が包接することが可能になり、より複雑な包接化合物(Fig. 1(c), (d))することが確認できた。当日は、これらの包接化合物の形成メカニズムの詳細について発表する予定である..

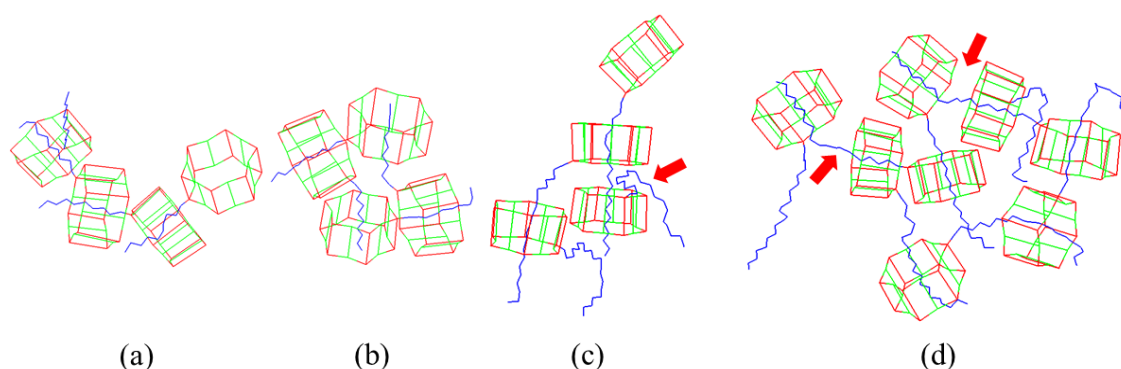


Fig. 1 Various structures of inclusion complexes. (a) Line, (b) ring, (c) branch, and (d) ring with branched points. Arrows point at branches.

【参考文献】

- 1) N. Urakami, J. Imada, and T. Yamamoto, *J. Phys. Chem.*, **2010**, 132, 054901.
- 2) T. Aoyagi, *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **2002**, 145, 267.