1P09

マングローブ細胞壁の分子動力学シミュレーション

○對馬優美子、木村健一郎、吉田真史
武蔵工業大学工学部（〒158-8557　東京都世田谷区玉堤 1-28-1）

【目的】熱帯・亜熱帯の汽水域に生育するマングローブは、海水中の金属イオンを吸着することが知られており、海洋環境の浄化に役立つことが期待されているが、その微視的メカニズムは、いまだ十分に解明されていない。筆者らは、すでに、細胞壁を構成するペクチン（図１）の糖配列の違いにより、Na イオンの吸着量が異なることを実験的に明らかにしており（図２）、本研究は、この結果を計算化学的手法により考察することを目的とする。

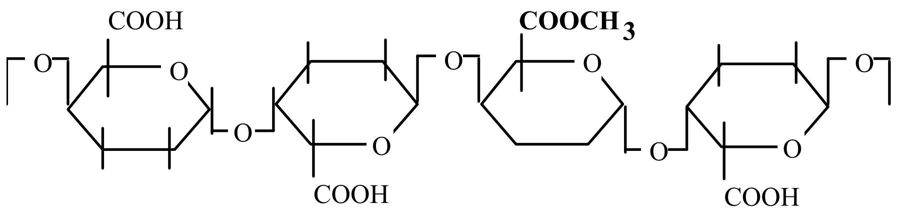

図１　細胞壁を構成するペクチン：環境によってガラクツロン酸とガラクツロン酸メチルの比率が変化する。

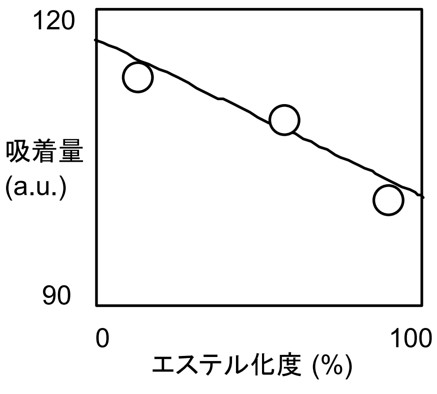

図２　Na+ の吸着量とガラクツロン酸メチルの比率（実験）

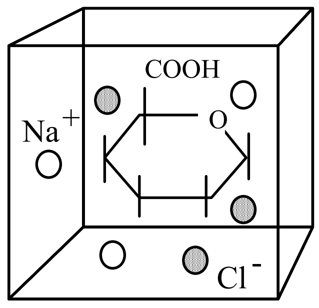

図３　モンテカルロ法の概念図

【結果】分子軌道法計算（AM1, PM3, 6-31G*）により、ガラクツロン酸、ガラクツロン酸メチルの水溶液中における最安定構造、電荷分布などを求めたところ、ガラクツロン酸の永久双極子モーメントはガラクツロン酸メチルの約 1.2 倍であり、Na イオンの吸着量が永久双極子モーメントに比例すると考えると、実験結果（図２）を説明できることがわかった。また、モンテカルロ・シミュレーション（図３）による Na イオンの吸着量も実験結果を再現することがわかった。