

グリセリン水溶液の分子動力学シミュレーション

○小林 修¹、林 治尚²、中野 英彦¹

1 兵庫県立大・院・工 (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 分子設計学グループ)

2 兵庫県立大・学術総合情報センター (〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167)

【1】緒言

グリセリン(1,2,3-propanetriol, glycerol)[C₃H₈O₃]は、代表的な多価アルコールであり、潤滑剤などの様々な工業原料になり化学的に重要な化合物である。また、グリセリン分子の3つのヒドロキシル基と脂肪酸とがエステル結合により脂質として生体内に存在するなど生体中においても重要な物質として知られている。

コンピュータシミュレーションの分野においては、グリセリンの研究はあまり行われていない。純溶液 (①)のシミュレーションなど数報あるぐらいである。グリセリンは、分子内に3つのヒドロキシル基を有し、水と特徴的に相互作用することが考えられる。また分子内自由度が存在するため、構造的に”flexible”な分子であり多くの立体構造を持つ。これらの複雑な立体構造や構造的挙動について、分子動力学法を用いて解析することは、興味深い。

今回は SHAKE 法を用いて、グリセリン水溶液の分子動力学シミュレーションを行った。

【2】分子モデル

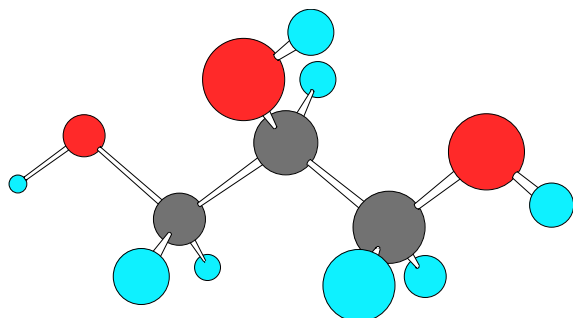


Figure 1. Molecular model of glycerol

Table 1. Parameter of glycerol (①)

Bond type	Length (Å)	Angle type	θ (deg)
H-O	0.97	C-C-C	109.5
O-C	1.43	C-C-O	109.5
C-C	1.54	C-C-H	109.5
C-H	1.09	C-O-H	108.5
		H-C-H	109.5
		O-C-H	109.5

シミュレーションで使用する分子モデルは、Figure 1.に示すような14点系の非 united atom モデルにし、Table 1.に示すようなパラメータを用いた。またグリセリンは分子内自由度を持った

Table 2. Torsion parameter of glycerol (①)

Torsion type	$K_{\phi}/\text{kJmol}^{-1}$	n
$\angle\text{C-C-C-H}$	0.6510	3
$\angle\text{C-C-C-O}$	0.6510	3
$\angle\text{O-C-C-O}$	0.6024	3
$\angle\text{O-C-C-H}$	0.6510	3
$\angle\text{H-O-C-C}$	0.6974	3
$\angle\text{H-O-C-H}$	0.6974	3
$\angle\text{H-C-C-H}$	0.6510	3

め、多くの2面角を持つ。Table 2.にそれら2面角の種類と各ポテンシャルの値を示し、式(1)とTable 2.の値を用いて、2面角ポテンシャルの計算を行った。

$$V_{\text{tor}} = K_{\phi} [1 + \cos(n\phi)] \quad (1)$$

詳細は、当日発表する。

(①) R.Cheli 他 Phys.Chem.Chem.Phys.,1999,1,871-877