

水中の乳酸オリゴマーの Tail-Tail ダイナミクスの分子動力学シミュレーション

(北大院工¹・北大工²) 佐藤 信一郎¹・○生井 克幸²

Molecular dynamics simulation of Tail-Tail dynamics of lactic oligomers in water

(¹Graduate School of Engineering, Hokkaido University, ²Faculty of Engineering, Hokkaido University) SATO SHIN-ICHIRO,¹ ○NAMAI KATSUYUKI²

The molecular motion of oligomeric chains in solution is of interest from the viewpoint of membrane permeability and biodegradability. Although polylactic acid is known as a biodegradable plastic and has attracted much attention, lactic acid oligomers exhibit unique biodegradability, suggesting that the dynamic motion of lactic acid oligomers in aqueous solution may be responsible for this. Molecular dynamics simulations revealed that lactic acid oligomers (15 to 20 dimers) exhibit Large Amplitude Coil-Globule Fluctuation (LACGF) motion, in which they violently move back and forth between the coil and globule states. However, the temperature dependence of lactate oligomer dynamics (Tail-Tail dynamics) has not been reported. In this study, we investigated the temperature response of Tail-Tail dynamics of lactic acid oligomers in aqueous solution using molecular dynamics simulation.

Keywords : MD simulation; Temperature-responsive polymer; Lactide acid oligomer

オリゴマー鎖の溶液中での分子運動が、膜透過性や生分解性の観点から興味をもたれている。ポリ乳酸は生分解性プラスチックとして知られ注目されているが、乳酸オリゴマーは特異な生分解性を示し、乳酸オリゴマーの水溶液中での運動性がその原因である可能性が示唆された。分子動力学シミュレーションによると、乳酸オリゴマー(15~20 量体)が、コイル状態とグロビュール状態を激しく行き来する大振幅揺らぎ (Large Amplitude Coil-Globule Fluctuation) 運動する事が見出された¹。しかし、乳酸オリゴマーの運動性の温度依存性についての報告はされていない。今回は分子動力学シミュレーションを用いて水溶液中乳酸オリゴマーの Tail-Tail ダイナミクスの温度応答性について調査した。

300 K の MD シミュレーションでは、17~19 量体は LACGF を示し、昇温によって LACGF に大きな変化は見出されなかった。しかし 280 K のシミュレーションでは 18,19 量体にグロビュール状態が高頻度で見られ、揺らぎが弱まっていた。

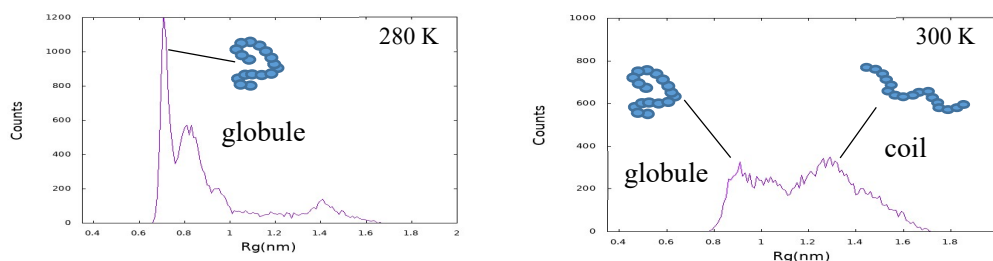


図 1 origo-DLA(19 量体)の R_g 分布の温度変化

- 1 C. Hori, T. Sugiyama, K. Watanabe, J. Sun, Y. Kamada, T. Ooi, T. Isono, T. Satoh, S.-I. Sato, S. Taguchi and K. Matsumoto, *Polym Degrad Stab*, 2020, **179**, 109231.