

金表面上の剛直性チオール自己組織化膜を用いたアミノ酸の結晶化制御 分子モデリングの一研究

核形成剤の使用により、物質の溶液から結晶化を活性化障壁を低下させて促進することが出来ます。

これらの添加剤は結晶化過程を制御するために、結晶種に類似する部分と化学的または構造的に溶質分子と異なる部分を持つように、設計することもできます。このような「デザイナー」核形成剤を用いて、結晶面の成長速度を変えたり多形の成長を制御したりすることができます。

Langmuir誌¹によると、イリノイ工科大学(米国、シカゴ)およびポリテクニック大学(米国、ブルックリン)の研究者グループは、不均一核形成剤として金上のチオール自己組織化単分子膜(SAM)を使用し、界面の分子間相互作用がL-アラニンおよびDL-バラニン結晶の核形成と成長に与える影響について研究しました。またさらに、**-グリシンの結晶形態における剛直性チオールのSAMおよび混合SAMの影響を調べました。**

Industry Sector

医薬

Organization

Illinois 工科大学, シカゴ
Polytechnic 大学, ブルックリン

Key Product

MS Morphology

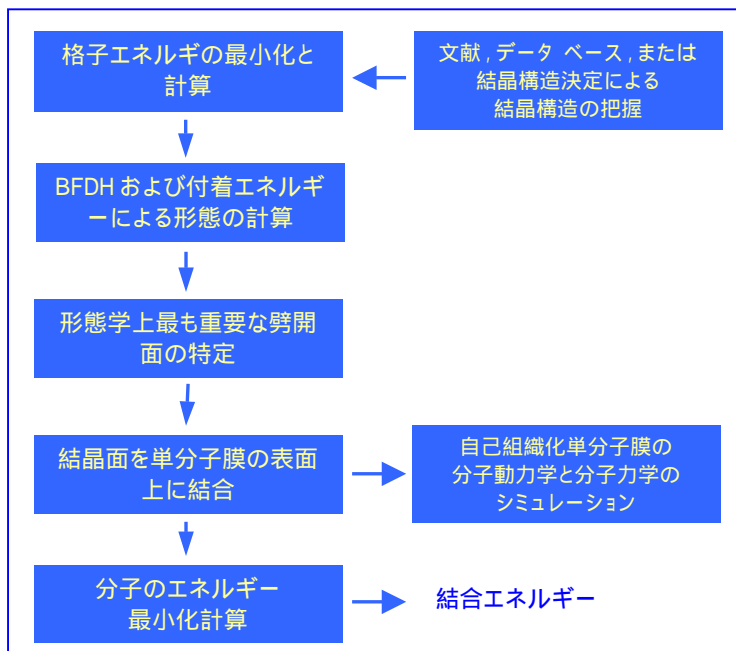


図1 方法論と手順の全容

この研究者グループは、粉末X線回折と界面角測定により、固体-溶液の界面ではアミノ酸がさまざまな結晶形態で核を形成することを見だし、単分子膜の組成構造が結晶化に強く影響することを示唆しています。

これら3種類のアミノ酸の結晶化における機能化SAMの影響および関連するプロセスについての深い理解を得る事を目的に、単分子膜表面と特定の結晶面の間における相互作用を調べるための分子モデリングの研究を行いました。各アミノ酸の形態は、アクセラリスのMorphologyモジュールを使用して予測されました。成長の遅い面が形態学的に最も重要であるということから、これらの面を結合エネルギーの計算対象として選択しましたが、この計算は分子最小化と分子動力学のシミュレーションによってさまざまなSAM上のこうした主要な面を結合することにより行いました。(方法論と手順の全体像については、図 1を参照してください。)

シミュレーションによって得られた、SAMと特定のアミノ酸結晶面の結合エネルギーは、アミノ酸の核形成面の観察結果と非常に良く一致し、この結果から結晶表面が単分子膜とどのように相互作用するか、および、どの面が優先的に核形成するかという点について洞察を得ることができました(図 2 を参照してください)。さらに、有機、無機結晶の不均一核形成と成長のナノテンプレートとしての自己組織化単分子膜をスクリーニングする時のツールとして、結合エネルギーが効果的であることをこの表面の計算が明らかにしました。

Allan Myerson 博士は「思い通りの特性を持つ分子結晶を設計する能力には、大変興味があります。成功は、結晶化過程を方向付ける重要な分子認識事象の特定と理解にかかっています。我々は分子モデリングによってこのことを研究することができ、さらに、核形成の促進および結晶成長の制御が可能となるさまざまなモチーフの超分子テンプレートを合理的に設計することができるのです。」と語っています。

この研究は、結合エネルギー計算が、有機結晶と無機結晶の核形成と成長に対する有力なテンプレートとして、自己組織化単分子膜を選別する有効な手段になり得ることを示唆しています。

References

1. Alfred Y. Lee, Abraham Ulman, and Allan S. Myerson, Langmuir, 2002, 18, 5886-5898.

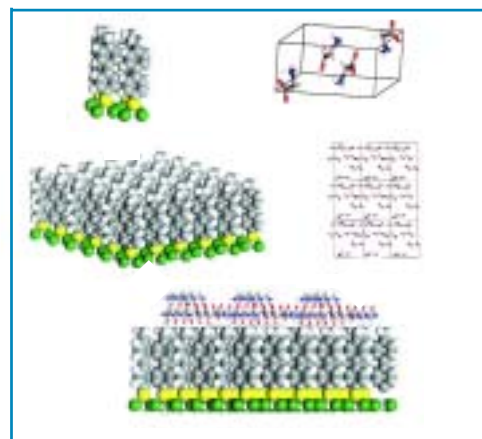


図 2 結合エネルギー計算の典型例。
4'-methyl-4-mercaptobiphenyl 表面へのグリシン(101)面の結合面および拡大面を示す。