
一般講演 | D 食品工学、加工、保蔵、バイオテクノロジー (Food Engineering, Process, Storage, and Biotechnology)

[2Mp] 食品物性

座長: 藤本 和士(関西大学)、粉川 美踏(筑波大学)、小泉 晴比古(広島大学)

2024年8月30日(金) 15:00 ~ 18:00 M会場 (2F N203)

16:00 ~ 16:15

[2Mp-05] 分子動力学計算によるトリアシルグリセロールの物性と分子構造の関係

*藤本 和士¹、北村 勇稀¹、目時 潤也²、岸 健汰²、辻野 祥伍²、吉村 和馬²、平井 浩² (1. 関西大学、2. 日清オイログループ株式会社)

キーワード：トリアシルグリセロール、分子動力学計算

【目的】

食品油脂の代表的な構成成分であるトリアシルグリセロール(TAG)はグリセロール骨格に脂肪酸が3つ結合した構造を有している。脂肪酸自体は直鎖の炭化水素鎖で構成されているにも関わらず、この脂肪酸の組み合わせで油脂の物性が大きく異なる。この TAGの構造と油脂の物性との関連は未解明であり、解明するには分子レベルからの知見を必要とする。我々は、3種類の TAGの分子動力学 (MD) 計算を実施し、それら分子の構造と油脂の物性の関連を明らかにすることを目的とした。

【方法】

カプリル酸(8:0)、オレイン酸(18:1)、(9,12,15)-リノレン酸(18:3)がそれぞれ3つ結合した3種類の TAGの MD計算を実施した。MD計算には GROMACSを用いた。力場には OPLSS-AAを用いた。これらの計算はスーパーコンピュータ「富岳」を用いて実施した。

【結果】

3種類の TAGの界面張力、密度、凝集密度エネルギーを計算した結果、界面張力および密度がよく実験値を再現しており、本 MD計算が妥当であることがわかった。界面張力は炭素鎖が短い油脂よりも長い油脂の方が大きい、その差は2割程度であった。一方で、密度に関しては炭素鎖が長い油脂の方が低いことがわかった。凝集密度エネルギーは全ての分子種で同じ値であった。以上から、油脂の静的な3つの熱力学量には大きな差がなかった。次に、動的熱力学量である自己拡散係数(D°)を3種類の TAGについて算出した。8:0と18:3の TAGの D° は同じ値であり、18:1の D° に比べて5倍大きな値であった。解析の結果、8:0は小さい分子のため大きな D° となった。18:3は18:1より二重結合が多く、水素原子が少ないことが原因で大きな D° となった。このように、静的熱力学量と D° の観点から分子構造と油脂の物性の関連を明らかにした。