

## Poly(ethylene-oxide)-水の系における結合

IVIC-Venezuela, Kraft Foods, USA と Los Alamos National Laboratory, USA の研究者たちは、コンピュータ技法を用いて、poly(ethylene-oxide) - 水の系、すなわち 'smart gels' と呼ばれる重要な成分における結合形成について研究してきました。

この技法では、poly(ethylene-oxide) (PEO) 鎖の周りに形成される水のナノコイルによって、低温および低濃度でPEOが水に対する親和性を示すことが明らかになりました。

このような研究の成果によって、このゲルの合理的な設計や合成が可能になり、化粧品、医薬、センサーなどの多くの技術的分野で応用されるでしょう。

Dr Manuel Marquez (Chemistry Division at Los Alamos National Laboratory および Director of the Nanotech Consortium (Kraft Foods の出資会社)) は、「コンピュータ技法のおかげで新しいゲル テクノロジーを設計できるようになりました。こうしたツールは、ナノ構造物質に関する物理や化学を詳細に理解するための鍵となります」

「知識が得られると、すぐに可能性のある技術的用途に応用できるため、計算化学はマテリアルサイエンスの分野で競合していくために不可欠なものとなります」と語っています。

PEOの技術的用途の多くは、水溶液中でのポリマーの物性によって決まります。たとえば、水中のPEOは、いわゆる'smart gels'の重要な構成要素であり、'smart gels'はエキゾチックな食品、化粧品、医薬、センサーやその他の技術的用途に将来応用される可能性があります。

Smart gelsは外部からの刺激に反応して、拡大や収縮をします[1]。この材料のサブクラスは'shake gels'(SG)と呼ばれるもので、合成粘土とPEOの水溶液によって形成されます。今までは、SGの設計と合成は、時間もコストもかかる試行錯誤による実験手順によってのみ行われていました。最近では、SGの成分間に働く相互作用の性質について理論的な予測が行われ、こうした材料の合理的な設計に道が開かれるようになってきました。

水と複数のPEOモノマー ( $(\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O})_n$  with  $n=2\text{-}40$ ) との結合について、DMol<sup>3</sup>を用いた密度汎関数理論の計算が行われ、計算された全体の静電ポテンシャルについてのトポロジーが分析されました。PEO鎖の周りでは、コイル状の水分子が、2箇所のエーテル酸素に水素結合していることがわかりました。らせん状の水は、PEOの酸素原子を取り囲む空洞に多くの水分子が集まることにより形成されます。

最初の溶媒和殻の結合が形成されると、水のO-H結合とPEOの孤立電子対の間に生じる協調的な静電相互作用によって2番目の水の殻が容易に形成されます。Amorphous Cellを用いて、水の2つの溶媒和殻(118分子)をPEOポリマーモデルの周りに配置し、その結果得られた構造を、DMol<sup>3</sup>によって最適化しました。

水分子は、O-C-C-Oの中心の格子間領域の内部(PEO酸素原子の近く)に集中し、炭素原子の周りでは激減することがわかりました。溶媒和殻の内部では、水は他の水分子と同様に、PEOとも水素結合します。

現在行われている計算では、低温および低濃度の条件で、水中でPEOモノマーが形成するO-C-C-Oの2平面が連続した構造について、親水性のtrans-gauche-transコンフォメーションが優先される傾向にあることが確認されていますが、これは以前に行われた実験的および理論的研究の予測結果と同じです

## Organization

Kraft Foods, USA Centro de Quimica IVIC, Venezuela NIST, USA Los Alamos National Laboratory, USA

## Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>  
BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell

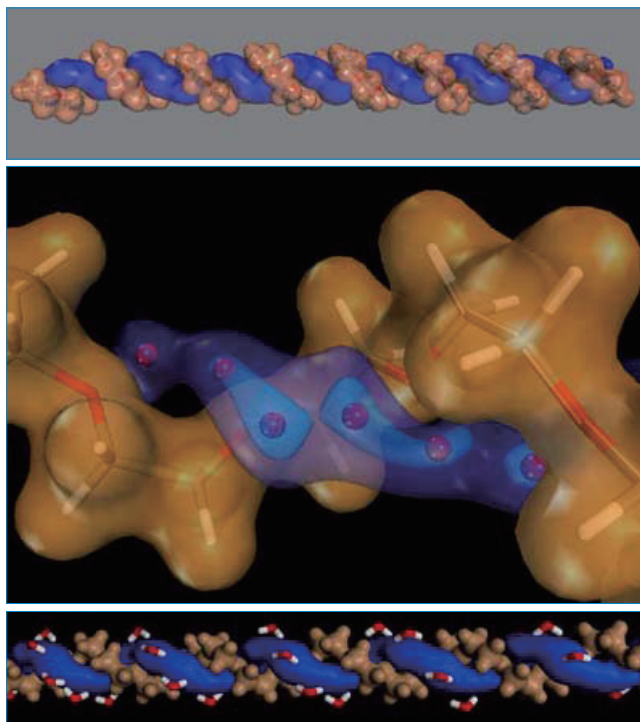


図 1 水-PEO<sub>20</sub> 系の全体的な静電ポテンシャルについてのトポロジーから、コイル状の水分子がポリマーの周りで水素結合していると予測されます。ブルーとブラウンで覆われているのは、ポテンシャルのマイナスとプラスの部分を示しています。酸素原子のポテンシャルの最小値(臨界点)は、赤い球形で示しています。

## 参考文献

See [http://www.nist.gov/public\\_affairs/newsfromnist\\_smartgels.htm](http://www.nist.gov/public_affairs/newsfromnist_smartgels.htm)

Yosslen Aray, Manuel Marquez, Jesus Rodriguez, David Vega, Yamil Simon-Manso, Santiago Coll, Calos Gonzalez, and David A. Weitz, J. Phys. Chem., **2003**, in print.