

BIOVIA COSMOtherm とそのオプションツール BIOVIA COSMOplex や BIOVIA COSMOperm を組み合わせて使用することで、ミセル、マイクロエマルション、分子膜等の自己組織化する液相状態のシミュレーションが行えます。具体的には、臨界ミセル濃度 (CMC) やマイクロエマルションを形成する組成の予測、ならびに分子膜構造の予測や低分子の分子膜透過性の予測が可能です。本紙では、ミセル関連の応用事例を紹介します。

■ 臨界ミセル濃度 (CMC) の推算

CMCは、水と界面活性剤の混合溶液系において、ミセル形成に必要な界面活性剤の下限濃度を指します。そのため、CMCは界面活性剤を特徴づける重要な物性値です。通常 CMCは実測する必要があり、その測定方法も間接的であるため、得られる値に統一性がないことがあります。そのため、物性推算によって定量的、あるいは半定量的に予測できれば、研究効率が向上します。

水と界面活性剤15種の混合系におけるCMCの推算値と実測値を図1に示します。図1より、推算値と実測値の間に非常に高い相関性があることが分かり、半定量的にCMCを予測できることを示しています。

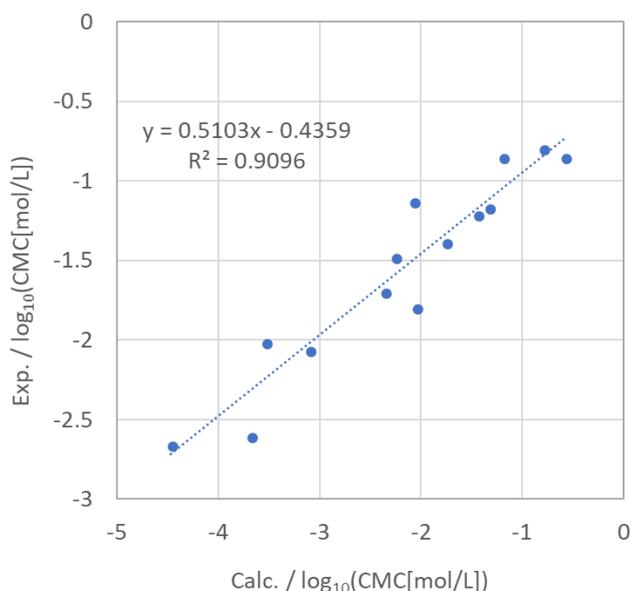


図1. 水と界面活性剤の CMC の推算値と実測値の比較

■ ミセル中の低分子分布の推算

BIOVIA COSMOplexでは、ミセルや分子膜構造の原子分布を予測し、CMCや界面張力などの物性値を推算します。さらに、得られた原子分布を用いて、その構造内の低分子の分布を予測できます。代表的な界面活性剤 SDS (Sodium dodecyl sulfate) の水中でのミセル構造を予測した例を図2に示します。図2から、極性部位を構成する硫黄や酸素原子が約22 Å付近に分布することが分かり、ミセル半径が22 Å程度であると推定されます。この値は、報告されている SDS のミセル半径18.4 Åに10%の誤差で一致しています。

次に、SDSミセル中の低分子の分布を予測した結果を図3に示します。油脂汚れのモデル分子として、パルチミン酸とオレイン酸、ならびに水溶性汚れのモデルとしてグルコース

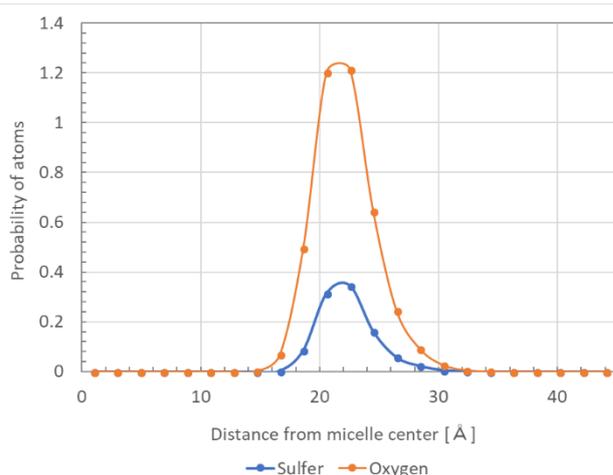


図2. ミセル中の SDS の硫黄・酸素原子の分布

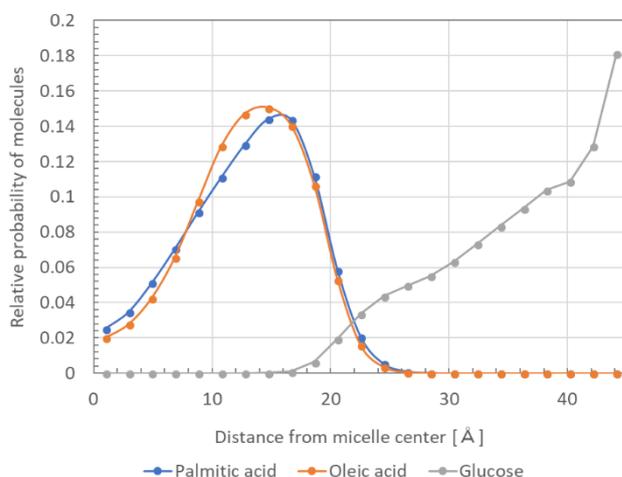


図3. SDS ミセル中の低分子の体積分布

の分布を検討しました。図3のように、パルチミン酸やオレイン酸はミセル内に分布し、一方、水溶性のグルコースは水相に分布することが分かります。このように、BIOVIA COSMOplexを用いてミセルに取り込まれる分子種のスクリーニングを容易に行えます。

本紙で紹介した CMC やミセル内低分子分布のほかにも BIOVIA COSMOplex や BIOVIA COSMOperm では以下の物性が予測可能です。

- ・ 表面張力、界面張力
- ・ 分子膜透過性
- ・ ミセル・分子膜内外の分配係数
- ・ ミセル・分子膜中の自由エネルギー