

平成 17 年 1 月 12 日

機能材料工学専攻	学籍番号	931513
申請者氏名	伴 和宏	

指導教官氏名	神野 清勝 平田 幸夫
--------	----------------

論文要旨 (博士)

論文題目	Basic Investigation on Retention Mechanism in Liquid Chromatography Using Molecular-dynamics Simulation (分子動力学シミュレーションによる液体クロマトグラフィー保持機構の基礎的検討)
------	--

(要旨 1,200 字程度)

<p>液体クロマトグラフィー (LC) は、現在さまざまな分野で最も一般的に利用されている分離分析手段のひとつであるが、その広範な利用にもかかわらず、現在においてもその分離機構は完全に解明されていない。そのため、分離条件の最適化は、分析者の経験に基づいて行われているのが現状である。LC において、溶質の保持は、溶質の固定相－移動相間での分配作用が最も大きく支配していることが知られており、特にその詳細な検討には、溶質と固定相との間の分子間相互作用についての詳細な理解が必要となる。溶質－固定相間の分子間相互作用において、分析中での固定相の表面状態を知ることは非常に重要である。</p> <p>現在、LC ではさまざまな種類の固定相が利用されているが、シリカゲル粒子にオクタデシルジメチルシランを結合したオクタデシルシリカ (ODS) は、現在最も一般的に利用されている固定相である。ODS 固定相の表面構造は、核磁気共鳴スペクトル (NMR) 法、フーリエ変換赤外分光 (FT-IR) 法、ラマン分光法、実際の LC 測定結果からの推定など、さまざまな方法によって評価・解析されているが、分子レベルでの理解には至っておらず、より詳細な評価法が求められている。</p> <p>本研究では、移動相及び固定相を含む分子モデルに対して、コンピュータシミュレーションの一つである分子動力学 (MD) 法を適用し、LC における保持機構の解明に重要な役割を果たす固定相の表面状態について、分子レベルでの解析を試みた。</p> <p>第 1 章では、本研究の概要ならびに目的について述べる。</p> <p>第 2 章では、分子動力学法の LC における分離機構の解明への適用の可能性について検討するため、LC における分離場のモデルとして、仮想的な固定相としてオクタデシルシランを一定間隔で配置し、移動相として水/メタノール混合溶媒、溶質として n-propylbenzene を含む簡単な分子モデルを作成し、種々の移動相組成での MD シミュレーションを行った結果について記述する。得られた結果は、簡単な分子モデルを用いた MD シミュレーションにおいても、移動相の組成が固定相の立体構造に変化を及ぼし、その結果推定されるアルキルリガンドのコンフォメーションは、実際の LC 分離などから得られる情報とよい一致を示した。</p> <p>第 3 章では、固定相をシリカゲル担体にオクタデシルシランを化学結合した ODS を選択した、より大規模な分子モデルに対して MD シミュレーションを適用し、移動相組成が ODS 固定相の表面構造に及ぼす影響について、より詳細な検討を行った結果について記述する。また、移動相組成の変化だけでなく温度条件を変えて MD シミュレーションを行った結果、温度変化がリガンドの立体構造に及ぼす影響が、ラマン分光法などの実測結果と良好な一致を示すことを見出したため、第 4 章において、MD シミュレーションにおける温度の違いが、固定相表面の構造に及ぼす影響について詳細に検討した結果について記述する。</p> <p>最後に、第 5 章で本研究の結論を述べる。</p>
--