

高速液体クロマトグラフィー(HPLC)用新規合成高分子キラル固定相の開発に関する研究

研究代表者 工学部 大石 勉

研究の目的

我々人間は光学活性物質(タンパク質、核酸、多糖 etc.)の集合体であり、光学異性体に対する識別能力を有する。かつて睡眠薬として使用されたサリドマイドは多くの奇形児が生まれるという悲劇をもたらしている。医薬などをラセミ体として使用することは時として非常に危険である。しかし、現在市販されている医薬品のうち約25%はキラル化合物であるが、そのうちの約半数はラセミ体である。これらについては鏡像体間の薬理活性、体内における動態の相違はあまり明らかではない。従って、今後両鏡像体の取得と生体における動態を調べるための微量分析技術の確立が不可欠である。高速液体クロマトグラフィー(HPLC)による光学分割は、適応範囲が広く、分取、分析の両方に利用できる極めて有力な方法である。本研究では、新たな材料としてこのHPLC用新規高分子キラル固定相の開発を目指す。

研究計画・方法

実験手順：1) 新規光学活性モノマーの合成、2) 重合および得られたポリマーの旋光性、3) HPLC用キラル固定相の調製および光学分割評価

研究成果

アミノ酸を原料として4種の光学活性モノマー(RMOC)を新規に合成した(Fig. 1)。RMOCのラジカル重合により得られたポリマーは、ウレタン部位(-NH-COO-)に起因する水素結合を有していることが確認された。シリカゲルとポリ(RMOC)から2種のキラル固定相 (type I, type II) を調製した(Fig. 2)。これらのキラル

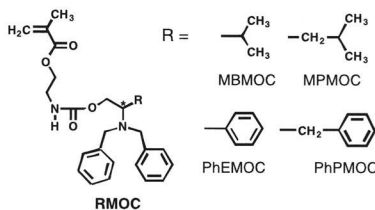


Fig. 1 Structures of chiral monomers

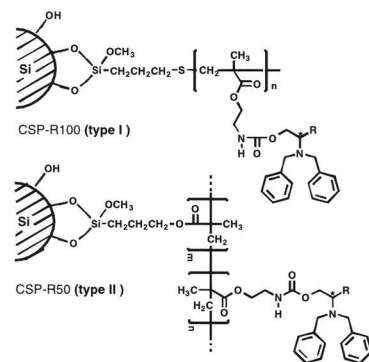


Fig. 2 Structures of chiral stationary phases for HPLC

ル固定相をカラム管(内径:0.2cm、長さ:15cm)に最大圧力200kg/cm²で充填し、HPLCにより種々のラセミ体に対する光学分割能を検討した。結果、マンデル酸やケトプロフェン、ヒスチジン、アスパラギン酸等に対して光学分割能を示した。尚、作成したカラムの実用化のためにはカラムの耐久性や効率等についてさらなる検討が必要である。また、今後他の光学活性なアルコールやアミンを用いた新たなキラル固定相の調製も期待される。

研究発表

- 1) Lee Yong-kyung, 鬼村謙二郎, 堤宏守, 大石勉: アミノ酸誘導体を側鎖に有する新規光学活性ポリマーの合成; 日本化学会中国四国支部・同九州支部合同大会講演概要集, p140, 1999.10.9-10.
- 2) Y. K. Lee, K. Onimura, H. Tsutsumi, and T. Oishi, *Polym. J.*, 32 (12), 1007-1016 (2000).

グループメンバー

氏名	所属	職 (学年)
大石 勉	工・応用化学工学	教授
李 鎔王景	理工・物質工学	D3

連絡先

電話 0836-85-9281 (ダイヤルイン)
FAX 0836-85-9201 (学科事務室)
E-mail: oishi@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp

材料設計のコンピュータ・シミュレーション

研究代表者 工学部 嶋村 修二

研究の目的

コンピュータ・シミュレーションによって、固体材料の構造と性質を研究し、材料設計のための知見を得ることが目的である。

本年度は、(1) 金属ナノコンタクトの機械的性質、(2) 固体の破壊による原子放出、についてシミュレーション研究を行った。

研究成果

(1) 金属ナノコンタクトの機械的性質

金(Au)ナノコンタクトの引張変形のモンテカルロ・シミュレーションを行った。Au原子間の相互作用をMorseポテンシャルで表し、温度300 Kのもとで、引張変形に伴う熱平衡原子配置の変化を求めた。

表1は、太さの異なる3種類のナノコンタクトのヤング率と降伏応力のシミュレーション結果を実験値と比較している。ナノコンタクトのヤング率はバルクと同程度であるが、降伏応力はナノコンタクトの方がバルクより数十倍大きい。これは、転位をもたないナノコンタクトの特性である。

(2) 固体の破壊による原子放出

固体材料の破壊による原子放出現象のメカニズムを探るため、2次元モデル粒子系の破壊のシミュレーションを行った。特に、破壊による粒子放出量と亀裂速度の関係について調べた。

図1は、破壊初期の亀裂速度と放出粒子数の関係を示している。亀裂速度がしきい値を超えると、放出粒子数が急増し、破壊の様相が亀裂進展から粒子放出へと変わる。

産業技術への貢献

将来に実現が期待されるナノデバイスの技術開発への基礎データを提供する。また、固体材料の切削過程の評価技術、効率的破壊法の技術開発につながる基礎研究である。

表1 ヤング率と降伏応力

	ナノコンタクト Sim.			実験	バルク 実験
	細	中	太		
ヤング率 (GPa)	43	85	99	40-100	79
降伏応力 (GPa)	12	16	18	2-8	0.2

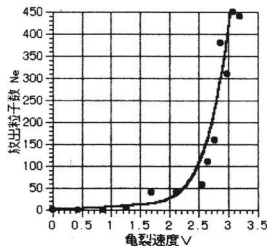


図1 亀裂速度と放出粒子数の関係

研究発表

- 1) S. Tanimori and S. Shimamura: Monte Carlo Simulation Study of Mechanical Properties of Au Nanowires; Technical Proc. 3rd Int. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems; Computational Publications, pp.110-113 (2000).

グループメンバー

氏名	所属	職 (学年)
嶋村 修二	工・共通講座	教授
谷森 奏一郎	(有)山口アイ・エム・エ	NEDO技術者
末永 香樹	工・機能材料	B 4
高巢 晶博	工・機能材料	B 4

連絡先

電話 0836-85-9809 (ダイヤルイン)
FAX 0836-85-9801 (共通講座事務室)
E-mail: simamura@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp