

非イオン界面活性剤／水系における共連続キュービック相の界面構造

(静岡大学¹、高輝度光科学研究センター²、オーストラリア国立大学³)

岡俊彦¹、太田昇²、Stephen Hyde³

【はじめに】

三重周期極小曲面様の構造を形成する物質はいくつか知られているが、リオトロピック液晶共連続逆キュービック相 (Q 相) もその一つである。I 型 Q 相ではジャイロイド (G) 型のみが観測されるが、II 型 Q 相ではプリミティブ (P) 型、ダイヤモンド (D) 型、G 型の 3 種類が確認されている。II 型では 2 分子膜の非極性領域にある中心面が極小曲面上に位置して 3 次元で周期的につながる。一方で I 型では極性領域の中心面が極小曲面上に位置する。

我々のグループでは II 型 Q 相である脂質モノオレイン／水系の Q 相 (1)、フィタントリオール／水系の Q 相 (2) それぞれについて小角 X 線単結晶構造解析に成功し、電子密度分布や界面構造を明らかにした。今回非イオン界面活性剤／水系で I 型 Q 相の小角単 X 線結晶構造解析に成功したので報告する。

【結果と考察】

I 型 Q 相の単結晶を作成し SPring-8 の BL40B2 で、回転結晶法を用いて回折データを収集した。このデータに対して既成のソフトウェアを用いて、回折斑点の指数づけ、強度積分などを行った。得られた構造振幅に対してモデルの最適化を行った。用いたモデルは、極性-非極性界面が無限周期極小曲面に平行な PS モデル、界面が平均曲率一定曲面になっている CMCS モデルである。最適化の結果、PS モデルは得られた構造振幅と R 因子が 0.05 程度とよく一致したが、CMCS モデルは 0.2 程度と一致を示さなかった。次に得られた構造振幅とモデルの位相を用いて電子密度を求めた。このことから極性領域はジャイロイド曲面上に位置しており、その極性-非極性界面は三重周期極小曲面の G 曲面に平行であった。非イオン界面活性剤分子の親水鎖の構造エントロピーを大きくするために、このような構造になっていると考えられた。

【参考文献】

- (1) Oka, “Polar-nonpolar interfaces of inverse bicontinuous cubic phases in phytantriol/water system are parallel to triply periodic minimal surfaces.”, *J. Phys. Chem. B*, (2017), 121, 11399
- (2) Oka, Ohta, and Hyde, “Small-Angle X-ray Crystallography on Single-Crystal Regions of Inverse Bicontinuous Cubic Phases: Lipid Bilayer Structures and Gaussian Curvature-Dependent Fluctuations”, *Langmuir*, (2018), 34, 15462