

環状および直鎖ポリエチレングリコールの金ナノシートへの吸着に関する分子動力学シミュレーション

(北大院総合化学¹・北大院工²) 中井 剛志¹・○佐藤 信一郎^{1,2}

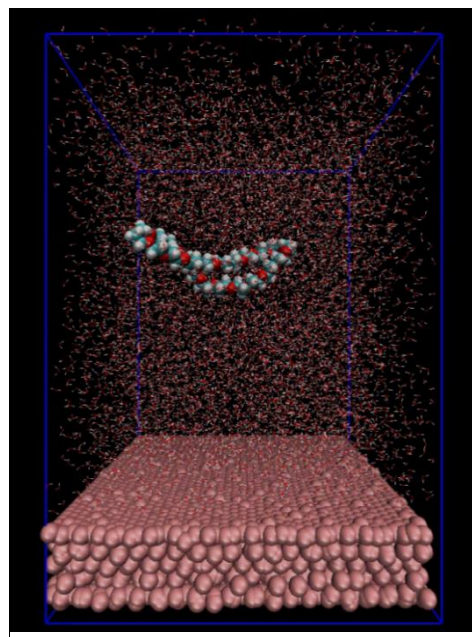
Molecular Dynamics Simulation on the Adsorption of Cyclic and Linear Polyethylene Glycols to Gold Nanosheet (¹*Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University*, ²*Graduate School of Engineering, Hokkaido University*) Tsuyoshi Nakai,¹ ○Shin-ichiro Sato²

Gold nanoparticles are materials of interest in many industrial and biological fields because of their unique optical properties. One drawback is that they are not stable and easily aggregate in solution, requiring the use of dispersion stabilizers. Thiolated polyethylene glycol (PEG) is used for this purpose, which modifies the surface of gold nanoparticles through sulfur-gold bonds. However, it has been reported that cyclic PEG without functional groups can be strongly physisorbed onto the surface of gold nanoparticles and significantly improve their dispersion stability. This study investigates this topology-dependent physisorption mechanism. Molecular dynamics simulations were performed to simulate the adsorption of linear and cyclic PEG onto gold nanosheets. Conformational changes due to adsorption and changes in the amount of adsorption as a function of temperature were investigated.

Keywords : *Molecular dynamics; Cyclic polymer; Physisorption*

金ナノ粒子は、そのユニークな光学特性から多くの工業、生物学的分野で関心を集める材料である。難点として、安定性に乏しく溶液中で容易に凝集してしまうため、分散安定化剤を要する。これにはチオール化したポリエチレングリコール (PEG) などが使われるが、これは硫黄-金結合によって金ナノ粒子の表面を修飾する。ところが、官能基を持たない環状 PEG が金ナノ粒子の表面に強く物理吸着し、分散安定性を大幅に向上させることが報告された。

当研究はこのトポロジー依存の物理吸着メカニズムを検討するものである。分子動力学シミュレーションを用い、金ナノシートと直鎖・環状 PEG の吸着シミュレーションを行った。吸着によるコンフォメーション変化や、温度変化に対する吸着量の変化について検討した。



1) Cyclic-PEG/water/gold nanosheet system used in the MD simulation