

水和 ZnO ナノクラスタへのヒスチジン吸着の第一原理分子動力学計算

First Principles DFT study of Histidine Adsorption on hydrated ZnO Nanocluster

みずほ情報総研 (株)¹, 東北大² ◯加藤 幸一郎¹, 福澤 薫¹, 熊谷 泉², 梅津光央²Mizuho Information & Research Institute, Inc.¹, Tohoku University²,◯Koichiro Kato¹, Kaori Fukuzawa¹, Izumi Kumagai², Mitsuo Umetsu²

E-mail: mitsuo@kuma.che.tohoku.ac.jp

無機材料基板へのバイオ分子の固着は、ナノ・バイオ境界領域においてバイオセンサーやナノイメージングなど多様な応用が期待されている技術である。そこで我々は、無機材料基板として ZnO に着目し、様々なペプチドの吸着を検証することで特異的に吸着するペプチドが存在する事を以前に報告した[1]。今回はそれらペプチドの吸着機構の微視的な理解を目的とした、ZnO ナノクラスタ表面の水和構造とヒスチジン吸着に対する第一原理分子動力学法による解析を行った。まず、ZnO ナノクラスタと水和水の系を対象とした分子動力学計算を実施して表面水和状態を評価した。その次に、クラスタ内で配位状態の異なる 3 種の Zn へ吸着した水分子とヒスチジンを置換した構造に対する分子動力学計算により、ヒスチジンの吸着特性の評価を行った。得られた結果として、ZnO ナノクラスタの表面水和状態としては、Zn は 4 配位になる事を好みクラスタ表面では水分子や OH を吸着しやすいことが分かった。また、クラスタ表面で向かい合う Zn と O の間で水素原子が共有されているような特徴的な構造も多く見られた。一方、ヒスチジンの吸着特性においては、クラスタ表面部分に存在する 3 配位の Zn, エッジ部分に存在する 3 配位の Zn, エッジ部分に存在する 2 配位の Zn への吸着特性を比較したが、表面 3 配位の Zn への吸着エネルギーが最大となり、脱水和の効果を加味した場合にも表面 3 配位の Zn へのヒスチジン吸着が最もエネルギー利得が大きいことが分かった。

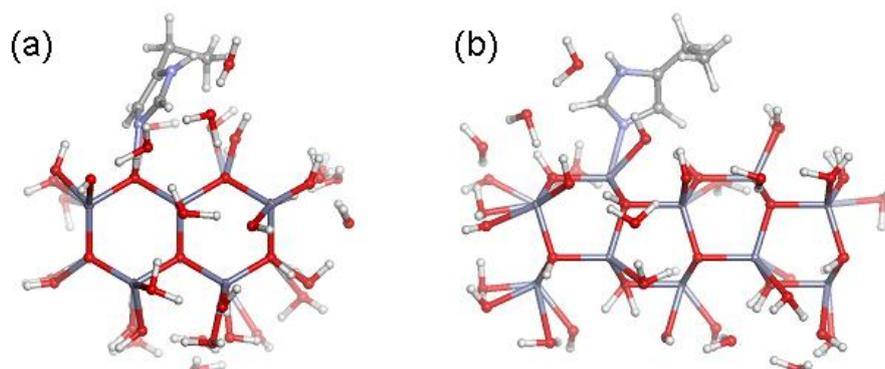


図 1 ナノクラスタ表面に存在する 3 配位の亜鉛に対するヒスチジン吸着構造 (分子動力学計算における 9500step 目の構造を (a) 正面 (b) 側面から見たもの。

赤 : 酸素、シルバー : 亜鉛、青 : 窒素、グレー : 炭素、白 : 水素)

[1] M. Umetsu, M. Mizuta, K. Tsumoto, S. Ohara, S. Takami, H. Watanabe, I. Kumagai, T. Adschiri, Adv. Mat. 17, 2571 (2005)