

亜鉛イオンを活性中心に有する人工炭酸脱水酵素の開発：理論計算化学からのアプローチ

(大阪大院基礎工¹・大阪大基礎工太陽セ²) ○山本 泰暉¹・原田 隆史²・中西 周次^{1,2}・神谷 和秀^{1,2}

Development of artificial carbonic anhydrases composed of zinc ions: A first-principles study (¹Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ²Research Center for Solar Energy Chemistry, Graduate School of Engineering Science, Osaka University) ○Hiroki Yamamoto¹, Takashi Harada², Shuji Nakanishi^{1,2}, Kazuhide Kamiya^{1,2}

Carbon capture utilization and storage (CCUS) technologies have attracted much attention to maintain a closed carbon cycle. An efficient catalyst for CO₂ hydration/bicarbonate dehydration reactions is expected to be an essential component for the CCUS technologies. Carbonic anhydrases with Zn-histidine complexes as the cofactor can facilitate these reactions in natural systems. However, the studies on developing abiotic catalysts are limited, and specific design guidelines have not been established. In the present work, we demonstrated that [Zn(3,3'-diaminodipropylamine)]²⁺ complex [Zn(dpt)]²⁺ facilitated CO₂ hydration reaction. Then, we succeeded in reproducing the experimental results by constrained *ab initio* molecular dynamics with water molecules.

Keywords: Carbonic anhydrase, Carbon dioxide hydration reaction, *ab initio* molecular dynamics

大気中の CO₂ ガスの高効率な回収・資源化技術の開発は人類が取り組むべき喫緊の課題である。CO₂ の水和およびその逆反応である炭酸の脱水反応を高速に進めることができる触媒は、新たな CO₂ 回収プロセスの重要な要素材料になると期待される。生物は亜鉛-ヒスチジン錯体を活性中心に有する炭酸脱水酵素により、これらの反応を高効率に進めることが知られている。しかし、本材料の人工化に向けた設計指針はいまだ十分に確立されていない。本研究では、亜鉛-ジプロピレントリアミン錯体が CO₂ 水和反応を促進することを実験的に明らかにし、その結果を第一原理分子動力学により再現することに成功した。本研究で行った計算化学手法を他の触媒材料に展開することで、網羅的解析が可能となり、人工炭酸脱水酵素の設計指針の確立につながると期待される。