2A03

Si(111)表面におけるアミノ酸の電子状態変化

(千葉大理物) ○小田将人，中山隆史

》生体高分子であるタンパク質は、生体中で起こる化学反応のほぼすべてにかかわる重要な触媒機能を持っている。そこで近年ナノテクノロジーの発展に伴って、医療、工業など、さまざまな分野でタンパク質の触媒機能をデバイスとして利用しようと注目が集まっている。

》タンパク質は、基本的には２０種類のアミノ酸の１次元鎖からなっている。１次元鎖はアミノ酸残基間のさまざまな相互作用によって折り畳まっていて、生理的な条件下ではある程度構造が決まっている。タンパク質の構造と触媒機能には密接な関係があり、何らかの外部的要因によって構造が崩れてしまうと、そのタンパク質は触媒機能を失うことがわかっている。タンパク質の構造を決める相互作用の１つとして、静電相互作用が上げられる。これは生理的条件下で正イオンになっているアミノ酸残基と、負イオンになっているアミノ酸残基が１次元鎖中のさまざまな場所にあり、それらが引力及び斥力を及ぼしあうことで、タンパク質の構造に大きな影響を与えるものである。これらのイオンは、あるｐＨの条件下では溶媒とのプロトンのやり取りによって中性になり、静電相互作用が働かなくなることによって、タンパク質全体の構造を変化させる。結果としてそのタンパク質は触媒活性を失ってしまう。（図１）

》そこで、タンパク質と半導体表面を接合することによって、溶液中のプロトン移動による電荷の変化を、図２のように半導体中のキャリア移動による電荷変化と考えることによって、アミノ酸のイオン・中性状態を制御し、タンパク質の構造を電気的に変化させ、タンパク質の活性・不活性状態をコントロールすることで、タンパク質の触媒機能をデバイスとして利用できる可能性がある。

》これまでの研究において、タンパク質の構成要素であるアミノ酸に注目し、Si(111)表面において、イオン・中性状態をキャリアドーピングによって制御できるかを検討してきた。非経験 Hartree-Fock 計算により、Si(111)半導体表面として、Si 原子８個のクラスターを用いてイオン性アミノ酸のうちヒスチジンであれば、上記のイオン状態制御の可能性があることを示した。しかし、このサイズのクラスターを半導体表面として扱ってよいかという問題がある。そこで本研究では、密度汎関数法に基づく第一原理計算をもちいて、シリコンを無限の２次元薄膜として同様の計算を行い、アミノ酸の電子状態がコントロール可能であるかを検討する。講演では詳細について議論する予定である。

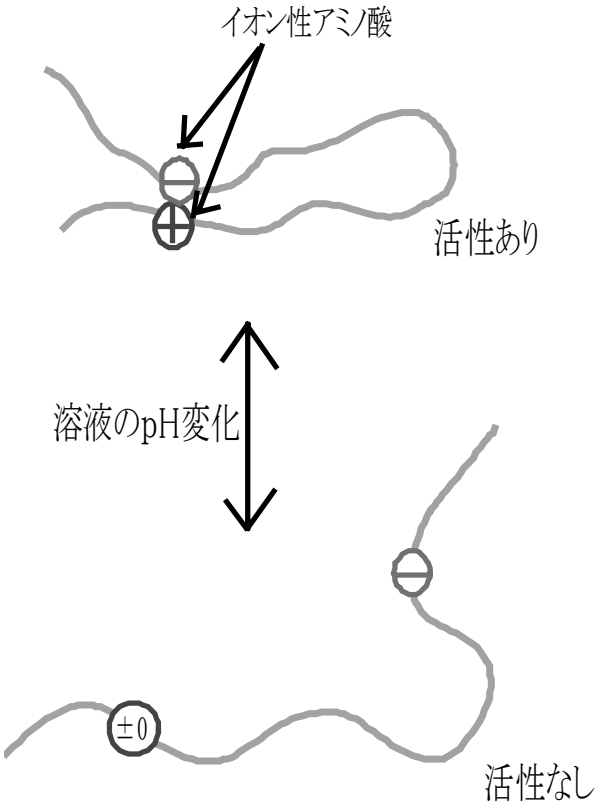

図1

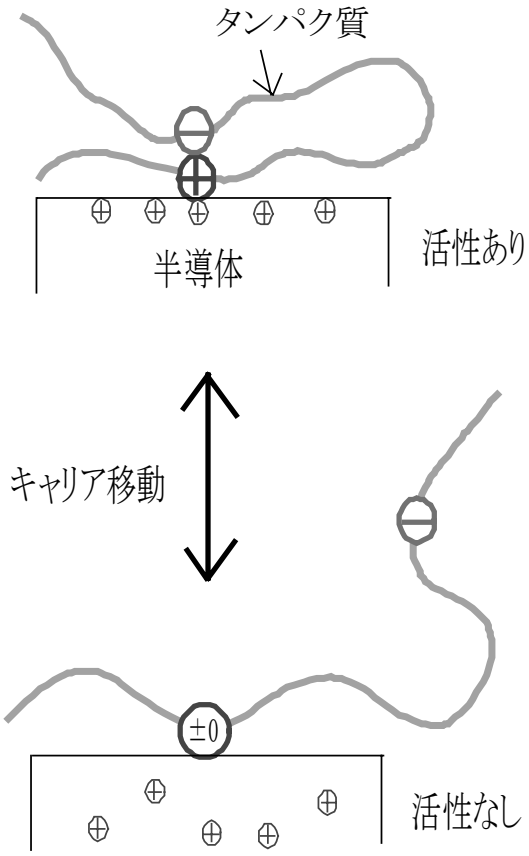

図2