

炭酸カルシウムカルサイト表面への有機分子吸着ダイナミクス：分子動力学研究 Dynamics of organic molecule adsorption on calcium carbonate calcite surface: a molecular dynamics study

灘 浩樹^{1*}

NADA, Hiroki^{1*}

¹ 産業技術総合研究所環境管理技術研究部門

¹EMTECH, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

生体内における炭酸カルシウムの結晶成長は、高分子やタンパク質、ペプチドなどの有機分子により制御されている。その成長制御機構を明らかにすることは、バイオミネラリゼーション機構を理解する上でも、また結晶モルフォロジー制御技術や新規有機/無機複合材料開発の基礎としても極めて重要である。しかしながら、結晶表面上の水分子や有機分子の吸着構造や動的性質を実験的に詳しく解析するのは難しい。このため、成長制御機構に対する我々の理解はまだ乏しいのが現状である。

我々は最近、炭酸カルシウムの結晶成長機構および不純物によるその成長制御機構を明らかにするための計算科学研究を開始した。その一つとして、炭酸カルシウムカルサイト表面上の水の構造とアスパラギン酸 (ASP) 吸着構造を調べる分子動力学 (MD) シミュレーション研究を行っている。講演では、そのシミュレーション結果を中心に述べる。

シミュレーションは、カルサイトの (104) 面と (110) 面に対して実施した。Ca²⁺ および CO₃²⁻ イオンと水分子に働く相互作用は、電荷間クーロンポテンシャルと原子・イオン間近接相互作用を仮定したシンプルなモデルを用いて計算した。ASP に働く相互作用は、CHARMM 力場パラメータを用いて計算した。シミュレーションの温度は 298 K とした。

シミュレーションの結果、(104) 面上には水分子の秩序配列層が形成されることがわかった。しかし、(110) 面上ではそのような秩序配列層は形成されなかった。また、(104) 面上の水の秩序配列層の形成は ASP の吸着構造にも大きく影響することがわかった。(104) 面上では、ASP が表面に直接吸着するのではなく、水の秩序構造層を一層挟んで吸着していた。吸着の自由エネルギーを詳しく解析したところ、複数の準安定吸着構造が存在することもわかってきた。詳細は講演で述べる。

本研究は文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「融合マテリアル」(領域 No. 2206、課題 No. 22107004) の支援を受けて実施している。

キーワード: バイオミネラリゼーション, コンピューターシミュレーション, 結晶成長, 表面界面, カルサイト, アスパラギン酸

Keywords: biomineralization, computer simulation, crystal growth, surface and interface, calcite, aspartic acid