

HOPG 基板上における分子配列のモデリング

Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

協同的な自己組織化プロセスを制御することで、外部刺激に対して高感度な応答を示す超分子システムの構築が可能となる。

本研究では、走査型トンネル顕微鏡(STM)を用いて、ジアリールエテン(DAE)-ペプチド結合体のオクタン酸/グラファイト界面での2次元自己組織化について調査した。DAE-ペプチド結合体の開環体は、反平行βシート構造を持つ安定した2次元分子集合体を形成した。表面被覆率の濃度依存性を定量的に解析した結果、同様の長さのアルキル基を持つ分子よりもオリゴペプチドを持つ分子の方が安定な配列を形成することが明らかになった(Figure 1)。

Materials Studio を用いた分子力学計算により、ペプチド鎖がアラニンのメチル基を液相に向けた反平行βシート構造が予測され、観測されたSTM像と良い一致を示した。



Figure 1. (a) STM images of **2o** at the octanoic acid/HOPG interface ($c_t = 200 \mu\text{M}$, $I_{\text{set}} = 10 \text{ pA}$, $V_{\text{bias}} = -800 \text{ mV}$). (b) High-resolution STM image of the molecular ordering of **2o** at the octanoic acid/graphite interface ($c_t = 200 \mu\text{M}$, $I_{\text{set}} = 40 \text{ pA}$, $V_{\text{bias}} = -800 \text{ mV}$) and the molecular model of **2o** simulated by MM/MD calculations. (c) Enlarged image of the molecular model showing the formation of an antiparallel β -sheet conformation composed of the GAGAG oligopeptide sequence. Yellow dotted line denotes the six-fold hydrogen bond network. (d) Concentration dependence of the surface coverages of **2o** and **3o** at the octanoic acid/graphite interface. The red and black solid lines denote the best-fit curves simulated by the nucleation–elongation model.

発表論文(謝辞なし)

1. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 5099–5102.