

石灰化機構の解明を目的としたリン脂質分子の反応における量子化学計算

(早大創造理工¹・早大院基幹理工²・岡山大医歯薬³)

○塩谷 恭史¹・ハラ エミリオ サトシ³・山口 勉功¹・国吉 ニルソン²

Elucidation of the mineralization reaction mechanism of phospholipids through quantum chemical calculations (¹*School of Creative Science and Engineering, Waseda University*, ²*Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University*, ³*Graduate School of Medicine, Dentistry and Pharmaceutical Sciences, Okayama University*)

○Takafumi Shiotani,¹ Emilio Satoshi Hara,³ Katsunori Yamaguchi,¹ Nilson Kunioshi²

Hydroxyapatite, a type of calcium phosphate, is the main component of bones and teeth, and is used as a raw material for artificial bones. Although it has been shown experimentally that phospholipids can be calcified, the reaction mechanism has not been elucidated. In this study, the hydrolysis reaction of some phospholipid molecules was considered as the initial step in the mineralization process and analyzed by quantum chemical calculations using Gaussian16. The activation energies of reactions of three kinds of phospholipids having different kinds of functional groups (R1, in Fig. 1) were calculated and the respective reaction dynamics were compared. The calculation results were compared with experimental results for consideration of a plausible reaction mechanism.

Keywords: hydrolysis; aqueous solution; reaction dynamics

リン酸カルシウム的一种であるヒドロキシアパタイトは、骨や歯の主成分であり、人工骨の原料として用いられる。リン脂質は石灰化することが実験により分かっているが、その反応機構は解明できていない。そこで本研究では、リン脂質の石灰化機構の解明を目的に、数種類のリン脂質分子の加水分解反応を石灰化過程の初期段階として考え、Gaussian16による量子化学計算による解析を行った。複数種類の官能基(図1中のR1)を有した3種類のリン脂質の加水分解反応の活性化エネルギーを計算してそれぞれの反応動力学を比較した。さらに、石灰化反応の実験結果と本研究の結果を照合し、反応機構について検討した。

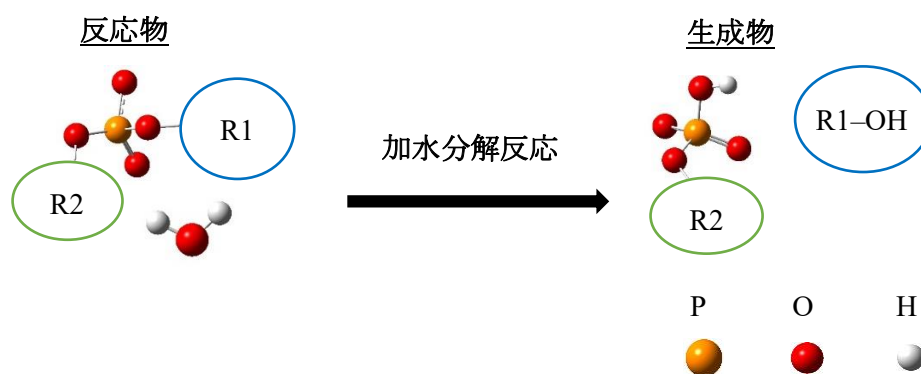


図1. リン脂質分子の加水分解反応の模式図