

リン脂質分子の石灰化反応における量子化学計算

(早大院理工¹・岡山大歯²)

○程雲昊¹・ハラエミリオサトシ²・国吉ニルソン¹

Quantum chemical calculations of the mineralization reactions of phospholipids

(¹Graduate School of Science and Engineering, Waseda University, ²Graduate School of Medicine, Dentistry and Pharmaceutical Sciences, Okayama University)

○Yunhao Cheng,¹ Hara Emilio Satoshi,² Nilson Kuniishi¹

Hydroxyapatite is a kind of material used in artificial bone. It has been confirmed that phospholipid molecules constituting cell membranes are mineralized, but the mechanism has not been clarified. In this study, in order to clarify the mineralization mechanism of phospholipid molecules, the quantum chemical calculation of Gaussian16 was used. There are many kinds of phospholipid molecules, two hydrolysis reactions of which are taken as research objects. B3LYP/6-31G (d, p) was used to optimize the structure before, during and after the reaction and analyze the kinetics of hydrolysis reactions. In addition, the activation energy was evaluated with high accuracy at the APFD/6-311+G (2d, p) level. There are many places where hydrolysis reactions take place in the aggregation of two phospholipid molecules and calcium ion. The sequence of hydrolysis reactions was compared. The activation energy of each reaction was compared, and the decomposition mechanism of phospholipid molecules was studied.

Keywords: Reaction Dynamics, Reaction Mechanism, hydrolysis

ハイドロキシアパタイトは人工骨として応用される材料である。細胞膜を構成するリン脂質分子は石灰化することは実験的に確認されているが、その機構は未だに未解明である。本研究では、リン脂質分子の石灰化機構を解明するために、Gaussian16 による量子化学計算を用いて解析を行った。リン脂質分子には複数種類が存在するが、そのうちの2種類の加水分解反応を研究対象とした。B3LYP/6-31G(d,p) を用いて、反応前、遷移状態、反応後の構造を最適化し、加水分解反応の動力学を解析した。また、APFD/6-311+G(2d,p) のレベルで活性化エネルギーを高精度で評価した。2個のリン脂質分子とカルシウムイオンと結合した集合体に加水分解反応を起こす箇所は複数ある。加水分解が起きる順番などを比較した。各反応の活性化エネルギーを比較し、リン脂質分子の分解反応の機構を検討した。

