

分子動力学法による膜構成分子と活性酸素種における反応機構の検討

Evaluation of the reaction mechanism between membrane component molecule and reactive oxygen species using molecular dynamics

首都大理工, °吉田 健人, 白井 直機, 内田 諭, 朽久保 文嘉

Tokyo Metro.Univ., °Taketo Yoshida, Naoki Shirai, Satoshi Uchida, Fumiyoshi Tochikubo

E-mail: yoshida-taketo@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、大気圧非平衡プラズマにおける安定形成技術が確立し、様々な生体応用の研究が進められている。特にプラズマ医療は急速に発展しつつある分野である⁽¹⁾。しかしながら、プラズマ照射による生体応答は複雑な反応過程を経て生じるため、不明な点が多い。最近では、細胞壁構成分子⁽²⁾や角質層⁽³⁾と放電活性種との相互作用が反応性分子動力学法により数値的に解析されている。本報では、細胞膜の主要な構成物質であるリン脂質に対して、活性酸素種である一重項酸素や過酸化水素といった種別に対する初期反応機構の違いを量子力学的分子動力学法により精査した。

2. 解析方法

本解析では、プラズマと生体表面の相互作用の一つとして生体由来のホスファチジルコリン(Phosphatidylcholine: PC)に対する酸素原子(O)、一重項酸素(¹O₂)、及び過酸化水素(H₂O₂)の照射をモデル化した。活性種はPCの上方または側方から照射した。計算条件や用いたソフトウェアは既報⁽⁴⁾と同様である。

3. 解析結果及び考察

図1に上方照射かつ照射エネルギー10 eVにおけるPCとO、¹O₂またはH₂O₂の反応素過程を示す。活性種がOの場合、PC中のOと結合し、PCからOを引き抜いた。照射する粒子種を¹O₂に変更した場合は、PC中のPと結合しているOと結合した。その後、結合状態のまま、PCから離脱した。H₂O₂ではPC中のPと結合し、時間が経過するとPCの一部を分離した。このようにPCに照射する活性種が異なると反応過程に違いが見られた。また、どの活性種においても照射エネルギーが1 eV以下では照射活性種の運動量の一部がPCへと変換されるだけであり、結合開裂といった化学反応は生じなかった。さらに活性種の照射方向を側方にした場合は、PC中のHの引き抜きやPCの形

状変形などの上方照射とは異なった特徴が観察された。なお反応が生じる照射エネルギーの閾値や原子間距離の評価については、当日報告する予定である。

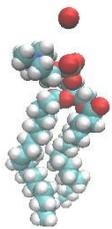
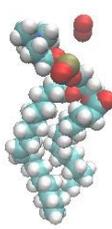
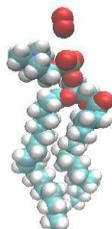
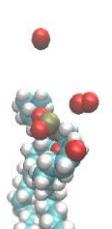
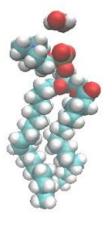
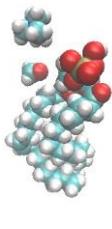
	Before irradiation	After irradiation
O		 0.4 ps
¹ O ₂		 0.25 ps
H ₂ O ₂		 0.9 ps

図1. 照射活性種に対する反応過程の相違
参考文献

(1) M. G. Kong *et al.*, *New J. Phys.* 11, 115012 (2009).

(2) M. Yusupov *et al.*, *J. Phys. Chem. C* 117, 5993 (2013).

(3) J. Van der Paal *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 48, 155202 (2015).

(4) 吉田健人ら, 第76回応用物理学会秋季学術講演会 16p-2V-3