

放電活性種と膜構成分子の水中反応機構における分子動力学解析

Numerical Analysis of Reaction Mechanism between Discharge Active Species and Membrane Constituent Molecules in Water Using Molecular dynamics

首都大理工, 吉田 健人, °内田 諭, 朽久保 文嘉

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

E-mail: s-uchida@tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、大気圧下におけるプラズマ形成技術が確立し、大気圧非平衡プラズマの医療応用が進められている。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、その機構の多くは未解明である。最近では、水チャンネルにおける活性酸素種の輸送⁽¹⁾や角質層の構造変化⁽²⁾が分子動力学法(molecular dynamics: MD)により数値的に検証されている。また、既報⁽³⁾において、著者らは細胞膜の主要な構成物質であるリン脂質に対して、酸素活性種照射における照射種別、照射方向および照射位置に対する初期反応機構の違いを量子力学的 MD により精査した。しかしながら、実際の脂質膜は気中反応とは異なり周囲を水分子で満たされている。本報では溶媒を考慮した凝集系における活性種の照射条件に対する反応過程の変化を精査した。

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周囲を水分子に囲まれたホスファチジルコリン(Phosphatidylcholine:PC)に対する酸素活性種の照射を付加的 MD でモデル化した。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⁽³⁾と同様である。

3. 解析結果及び考察

図 1 に上方照射、照射エネルギー0.1, 1.0 及び10 eVにおけるPCと¹Oの反応過程を示す。0.1 eV 時は溶媒である H₂O と結合する様子が見て取れる。O と H₂O の一般的な化学反応として、2つのヒドロキシルラジカルの生成がある。またヒドロキシルラジカル同士の反応として H₂O₂ が生成される。本条件では O と H₂O が反応して、2つのヒドロキシルラジカルを生成し、それらが結合して H₂O₂ になったと推察される。1.0 eV 時では溶媒、POPC 共に反応が見られなかった。10 eV では照射種が

POPC に衝突後、結合の反応が確認された。気中での照射時は、照射種が POPC の O を分離させたが、本条件ではエネルギーが周囲の溶媒に分散されたため、O が分離されなかったと考えられる。他の照射条件については当日報告する予定である。

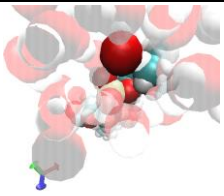
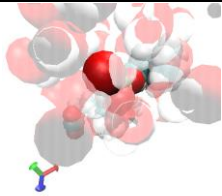
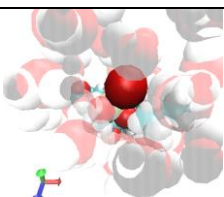
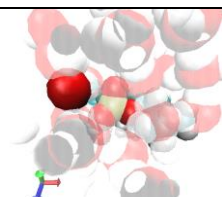
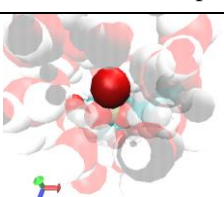
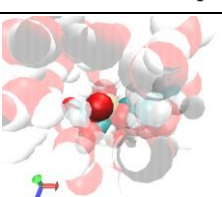
¹ O	Before irradiation	After irradiation
0.1 eV	 0 ps	 0.33 ps
1.0 eV	 0 ps	 0.50 ps
10 eV	 0 ps	 0.06 ps

図 1. 上方照射における照射エネルギー依存性

参考文献

- (1) M. Cordeiro, Biophys. Biochem. Acta, 1850 (2015) 1786-1794
- (2) J. Van der Paal *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys., 48, 155202 (2015).
- (3) 吉田ら, 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会 15p-B7-12 (2016)