

# 人工網膜分子 (NK5962) のカウンターイオン置換： 第一原理分子動力学シミュレーション

Effects of counter-ion substitution on properties of artificial-retinal molecule :

*ab initio* molecular dynamics simulations

広島工大<sup>1</sup>, 岡山大<sup>2</sup> °大村 訓史<sup>1</sup>, (B)佐藤 郷介<sup>2</sup>, (M2)山下 功一郎<sup>2</sup>,

内田 哲也<sup>2</sup>, 鶴田 健二<sup>2</sup>

Hiroshima Inst. Tech.<sup>1</sup>, Okayama Univ.<sup>2</sup>, °Satoshi Ohmura<sup>1</sup>, Kyosuke Sato<sup>2</sup>, Koichiro Yamashita<sup>2</sup>,

Tetsuya Uchida<sup>2</sup>, Kenji Tsuruta<sup>2</sup>

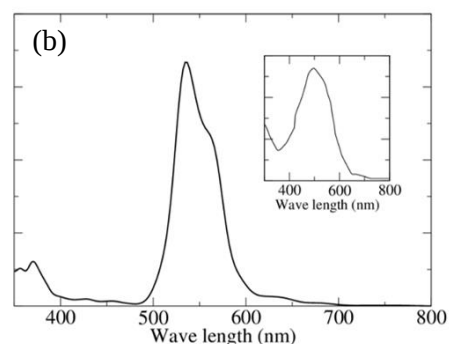
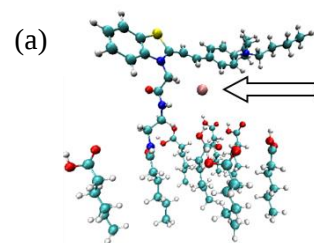
E-mail: s.ohmura.m4@cc.it-hiroshima.ac.jp

視細胞の機能を人工物で代替する人工網膜は、網膜色素変性の治療法の候補として有望視されている。岡山大を中心とするグループが近年提案した光電変換色素分子を使った人工網膜 (OUReP™)<sup>1</sup>は、従来の方式に比べて解像度が非常に良く、かつ生体との相性も良いが、臨床応用へ向けて化学的・熱的安定性が課題となっている。我々は、この人工網膜に用いられている光電変換色素分子 (人工網膜分子 NK5962) に対し第一原理分子動力学法に基づく計算機シミュレーションを行い、人工網膜分子の基礎物性を調べるとともに、人工網膜分子の改良の方法を探っている。今回我々は、この人工網膜分子のカウンターイオンに着目し、イオン置換による光応答や熱的安定性などの物性への影響を調べた。

図はシミュレーションに使用しているモデルシステムとシミュレーションによって得られた光吸収スペクトルを示している。計算には光電変換色素 (NK5962) をエチレン鎖の先端につけたモデルシステムを使用し、光吸収スペクトルは線形応答時間依存型密度汎関数法<sup>2</sup>を用いて求めた。

計算から得られた吸収特性は、実験から得られた特性<sup>3</sup>を矛盾なく再現している。本研究では、図(a)の矢印で示しているカウンターイオン (臭素) を別のハロゲン元素に変えて計算を行い、光吸収特性や熱安定性などの物性変化を詳しく調べた。講演では、ハロゲン元素だけでなく、 $(CF_3SO_2)_2N^-$  分子に置き換えた結果も紹介する。さらに人工網膜分子の光吸収によって生じた励起電子・ホール挙動に関しても議論する。

1. Alamusi *et al.*, *Artif. Organs* **16**, 343 (2005)
2. S. Ohmura *et al.*, *AIP Adv.* **6**, 015305(2016)
3. A. Uji *et al.*, *Artif. Organs* **29**, 53 (2005)



(a) Structure model of the artificial-retinal molecule, where the arrow indicates counter-ion. (b) Calculated absorption spectrum of the molecule: in the inset the experimental result<sup>3</sup> is shown for comparison.