

量子化学計算を用いた放電活性種と膜構成分子の反応解析

Reaction analysis of discharge active species and membrane constituent molecules using Quantum chemistry calculation

首都大院システムデザイン ○戸田和希 内田諭 栃久保文嘉

Tokyo Metropolitan Univ. ○Kazuki Toda, Satoshi Utida, Fumiyoshi Tochikubo

E-mail: toda-kazuki@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、安定生成技術の確立した大気圧非平衡プラズマが注目されており、その応用としてプラズマ医療が急速に発展している。現在では、医療効果に関する臨床試験も多く行われており、齶蝕殺菌やアポトーシス誘導、火傷治療において有効性が確認されている。本技術ではプラズマの照射量の変化により細胞の不活性化から再生まで幅広く制御することが可能である。しかし、プラズマ照射における生体との相互作用は未だ不明な点が多く、未解明である。複雑な分子相互作用を定量的に把握するためには数値シミュレーションによるモデル解析が必要である。

本研究の目的は細胞膜に対する放電活性種の影響を詳細に解明することである。本研究では主目的の前段階として原子分子の電子配置を高精度に解析できる量子力学計算単独で活性種と膜構成分子間の反応工程やポテンシャルエネルギー曲線を精査する。量子化学計算はGaussian09を用いて計算を行った。

2. 原理及び解析方法

量子化学計算は半経験方法、非経験的方法、密度汎関数法(DFT)の3つに大別できる。今回我々は密度汎関数法を用いた。DFT法は実験結果と十分な一致を得られることができ、シュレディンガー方程式を解く他の2つの計算より計算コストが小さい。DFT法では以下で示すコーン・シャム方程式を解くことにより分子軌道やエネルギーを求める。

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{eff}(r)\right)\varphi_i = \varepsilon_i\varphi_i \quad \cdots(1)$$

本解析では細胞膜と放電活性種の反応解析の初期段階として膜構成分子における仮想的な脂肪酸部位メタン(CH₄)酸化時の検証を行った。今回使用した仮想モデルはFig.1に解析モデルを示す。用いた理論モデルはB3LYP。初期位置はC-O間は0.75Å、計算点は26点、刻みは0.1Åで離していき各点でエネルギー計算を行った。

3. 解析結果

解析結果をFig.2, Fig.3に示す。Fig.2, Fig.3

よりCH₃-Oの最も安定しているのは1.35ÅのときでありCH₃-OHの場合では1.1Åのときである。十分に離れた点を基準としたときの結合エネルギーに相当する値はそれぞれ118.88, 130.63 (kcal/mol)であった。このことからOよりOHの方が反応性が高いことがわかる。



Fig.1. Analysis model

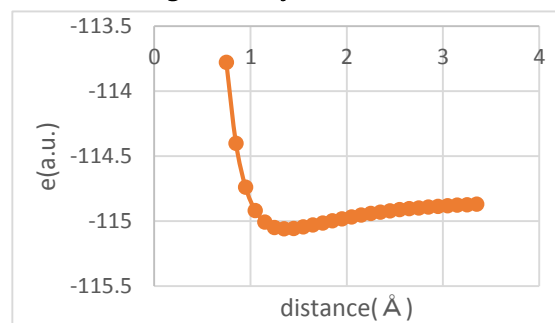


Fig.2. Potential curve of CH₃-O

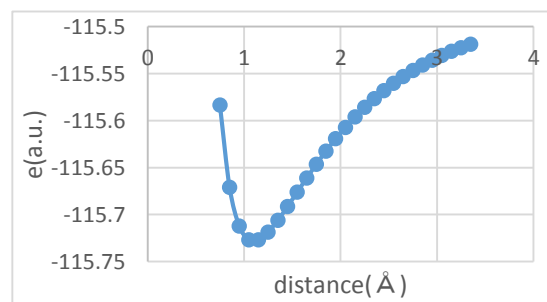


Fig.3. Potential curve of CH₃-OH

文献

- (1) M.G.Kong et al., New J. Phys. **11**, 115012 (2009)
93-95 (2015)
- (2) S.Uchida, et al., J. Phys D: Appl. Phys. **50**,
395203 (2017)