

セラソーム表面電子状態に対する多角形構造の影響

Effect of polygonal structures on electronic states of a cerasome surface model

和歌山大シスエ, 井口 楓梨, [○]小田 将人Wakayama Univ.¹, Karin Iguchi, [○]Masato Oda

E-mail: moda@wakayama-u.ac.jp

内服薬や注射薬を用いた治療では原理的に副作用が伴う。副作用を抑えるための方策として、薬剤を内包したカプセルを患部付近まで運び、その後、開封することで患部のみに薬剤を作用させるドラッグデリバリーシステム(DDS)が注目されている。DDS の新規薬剤キャリアとして注目されているセラソームは、従来のリポソームの表面をシロキサン結合で強化した脂質 2 重膜ベシクルである[1]。表面のシロキサン結合によりキャリアとしての安定性が向上した一方で、DDS の要となる薬剤放出のためには、結合を切断する必要があるという課題がある。これまで、我々はセラソームの簡単な表面モデルを構築しそのモデルに対する密度汎関数に基づく第一原理電子状態計算(DFT 計算)を行った。その結果、Si-O 結合の反結合性軌道が孤立準位として HOMO バンドと LUMO バンドのギャップ中に現れることを明らかにした[2]。この反結合性軌道にうまく電子を注入できれば Si-O 結合を切断できるため、セラソームのベシクル構造を壊すことが可能となる。しかし、これまでのモデルはシロキサン結合ネットワークはすべて 6 員環構造を仮定した最も単純なものであった。現実のセラソーム表面にはその他の環構造などが存在しているため、これらが電子状態にどのような影響を及ぼすかを明らかにする必要がある。

本研究では、これまでのセラソームモデルを拡張し、5, 7 員環やいくつかの表面置換基を含むモデルを構築した(図 1)。そのモデルに対して DFT 計算を行った。安定性や状態密度などの解析を行った結果、多角形構造モデルの方が安定であり、またセラソーム開封の要となる孤立した反結合性軌道は縮退が解けることによって電子注入可能なエネルギー範囲が広がることが明らかとなった。

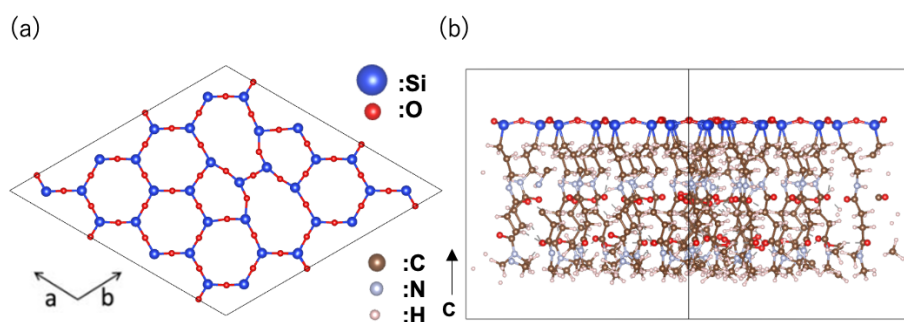


図 1 : セラソーム表面モデル。(a)top view (表面シロキサンネットワークのみ表示)、(b)side view。

[1] K. Katagiri, et. al., J. Am. Chem. Soc, **124**, 7892(2002).

[2] Masato Oda, JJAP, **58**, SIID04(2019).