

複数種類のリン脂質分子の加水分解反応における量子化学計算

(早大院理工¹・岡山大歯²)

○程雲昊¹・ハラエミリオサトシ²・国吉ニルソン¹

Quantum chemical calculations of the mineralization reactions of phospholipids

(¹Graduate School of Science and Engineering, Waseda University, ²Graduate School of Medicine, Dentistry and Pharmaceutical Sciences, Okayama University)

○Yunhao Cheng,¹ Hara Emilio Satoshi,² Nilson Kuniishi¹

Hydroxyapatite obtained from phospholipid molecules constituting the cell membrane is a kind of material used in artificial bones. It has been experimentally confirmed that phospholipid molecules can be mineralized, but its mechanism has not been clarified yet. In order to clarify the mechanism of the mineralization of phospholipid molecules, calculations were carried out using the Gaussian 16 quantum chemical calculation software. By using the B3LYP/6-31G (d, p) level, the structures before, during and after the reaction were optimized, and a high accuracy activation energy was obtained at the APFD/6-311+G (2d, p) level. There were several kinds of phospholipid molecules, and the simulation of hydrolysis reactions were carried out on phosphatidylcholine (PC) and phosphatidylserine (PS). There are several bonds that can be the hydrolyzed. The activation energies of PC and PS reactions were compared, and the mechanism of hydrolysis of phospholipid molecules was examined.

細胞膜を構成するリン脂質分子から得たハイドロキシアパタイトは人工骨として応用される材料である。リン脂質分子が石灰化することは実験的に確認されているが、その反応機構は明確ではない。本研究では、リン脂質分子の石灰化機構を解明するために、Gaussian16 量子化学計算ソフトウェアを用いて計算を行った。B3LYP/6-31G(d,p)レベルを用いて、反応前、遷移状態、反応後の構造を最適化し、APFD/6-311+G(2d,p)レベルにて高精度の活性化エネルギーを求めた。リン脂質分子には複数種類が存在し、そのうち phosphatidylcholine (PC) と phosphatidylserine (PS) を研究対象として加水分解反応のシミュレーションを行った。2 個のリン脂質分子とカルシウムイオンと繋がった集合体に加水分解反応を起こす結合は複数ある。PC と PS が起こす各反応経路の活性化エネルギーを比較し、リン脂質分子の加水分解反応の機構を検討した。

