

陽電子付着したアミノ酸の理論計算

¹埼玉大理, ²横浜市大院・生命ナノ

○杉浦悠太郎¹, 鈴木健人¹, 高柳敏幸¹, 北幸海², 立川仁典³

Theoretical calculations of positron-attached amino acids

○Yutaro Sugiura¹, Kento Suzuki¹, Toshiyuki Takayanagi¹,
Yukiumi Kita², Masanori Tachikawa²

¹ Department of Chemistry, Saitama University, Japan

² Graduate school of Nanobioscience, Yokohama City University, Japan

【序】陽電子は電子と同じ質量, スピン量子数もち, 正の電荷をもつ反粒子である. また特徴として電子と陽電子が出会うと, ガンマ線数本を放出し対消滅が起こる. この興味深い性質から医療の分野では, 陽電子断層法(PET)が使われている. これは, 糖の一部を陽電子放出核種に変えたものを体に投与し対消滅によって生じたガンマ線を検出することで癌細胞が生体内のどこにあるかを調べることができる技術である. このように, 陽電子は, 現代社会において広く用いられているが, 原子レベルでの分子との相互作用は, あまりわかっていない. そこで我々は陽電子付着した生体分子の一つであるアミノ酸について多成分分子軌道法を用いて理論計算を行った.

【計算方法・結果】

分子内水素結合を形成している 5 つのアミノ酸(アスパラギン, システイン, グリシン, プロリン, セリン)について, 構造最適化(DFT(B3LYP/6-311++G(d, p)))を行った. 得られた構造は Figure 1 のようになる. 我々は, 分子内の OH 間距離を変えて多成分分子軌道(MC_MO)法より陽電子親和力(HF/[6-311++G(d, p) / $e^+11s11p11d$])を計算した^[1-3]. 得られたポテンシャルエネルギー曲線を図 2 に示す. 5 つのアミノ酸において, OH 間距離が大きくなるにつれて, 分子内で電荷の偏りが生じ, 陽電子親和力が大きくなる. 結果として, 陽電子付着により, 双性イオンの構造の安定化が起こりうることを示唆している^[4]. 詳細は当日発表する.

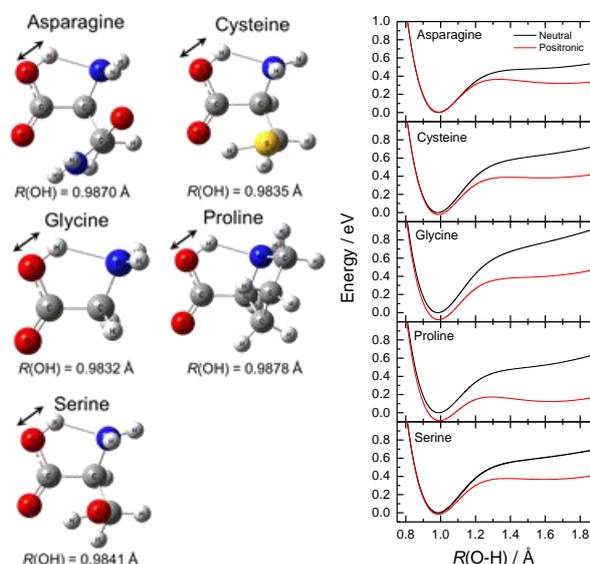


Figure 1 (left) Hydrogen-bonded structures of five amino acids
Figure 2 (right) One-dimensional potential energy curves as a function of the OH distance

【参考文献】

- [1] M. Tachikawa, K. Mori, K. Suzuki, K. Iguchi, *Int. J. Quantum. Chem.*, **70**, 491-501 (1998).
- [2] M. Tachikawa, K. Mori, H. Nakai, K. Iguchi, *Chem. Phys. Lett.*, **290**, 437-442 (1998).
- [3] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.*, **350**, 269-276 (2001).
- [4] Y. Sugiura, K. Suzuki, T. Takayanagi, Y. Kita, M. Tachikawa, *J. Comp. Chem.* in press.