

# 活性酸素種

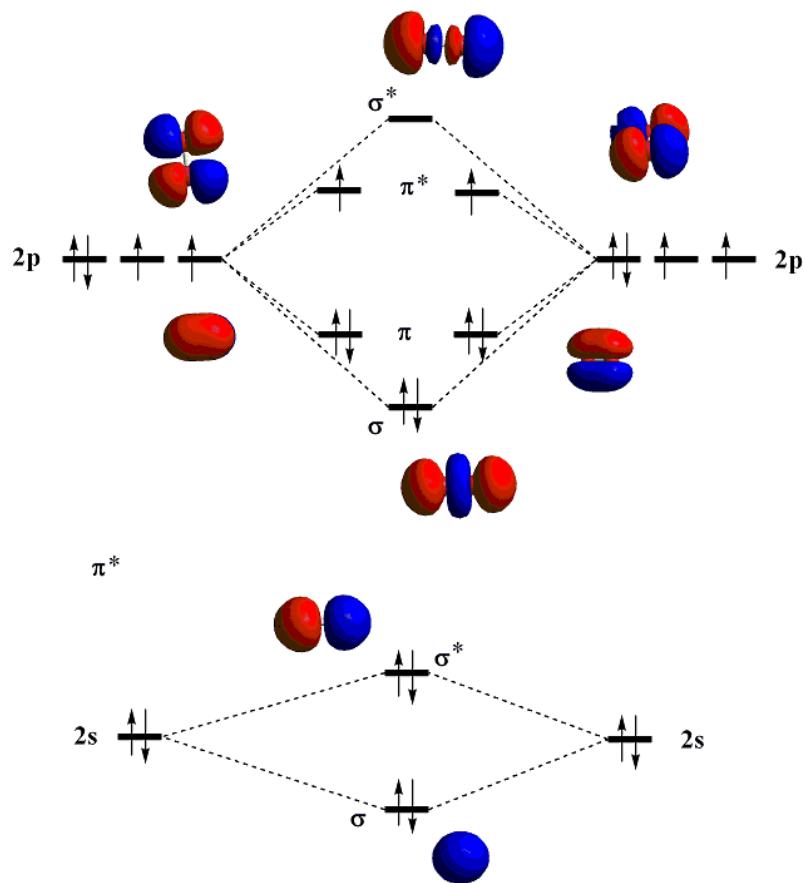
## reactive oxygen species (ROS)

反応性の高い酸素種を一般に活性酸素種とよぶ。

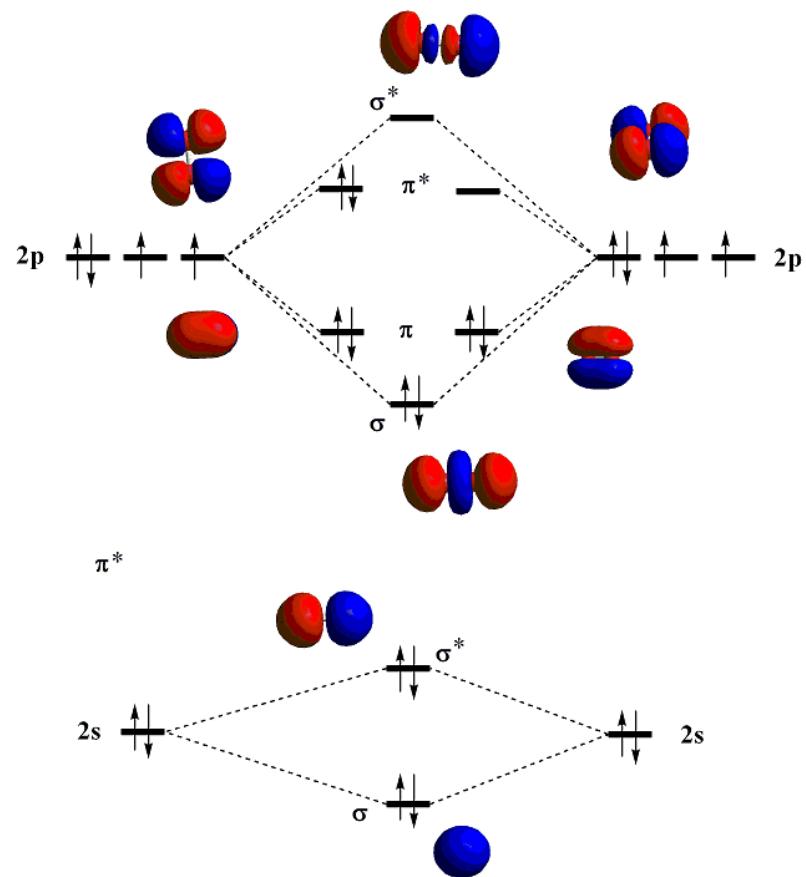
1. 一重項酸素 singlet oxygen  ${}^1\text{O}_2$
2. スーパーオキサイドアニオンラジカル  
(superoxide anion radical,  $\cdot\text{O}_2^-$ )
3. 過酸化水素 (hydrogen peroxide,  $\text{H}_2\text{O}_2$ )
4. ヒドロキシルラジカル( $\cdot\text{OH}$ )
5. オゾン (ozone,  $\text{O}_3$ )

プリント p.35～  
テキスト p.182～

Text p.68



三重項酸素  
triplet oxygen       ${}^3\text{O}_2$



一重項酸素  
singlet oxygen       ${}^1\text{O}_2$

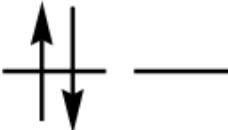
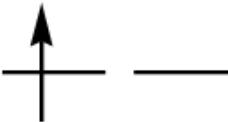
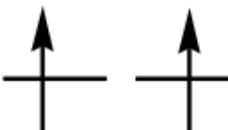
Text p.184

# スピン多重度

電子はスピン量子数  $m_s$  を有し、その値は  $+1/2, -1/2$  である。

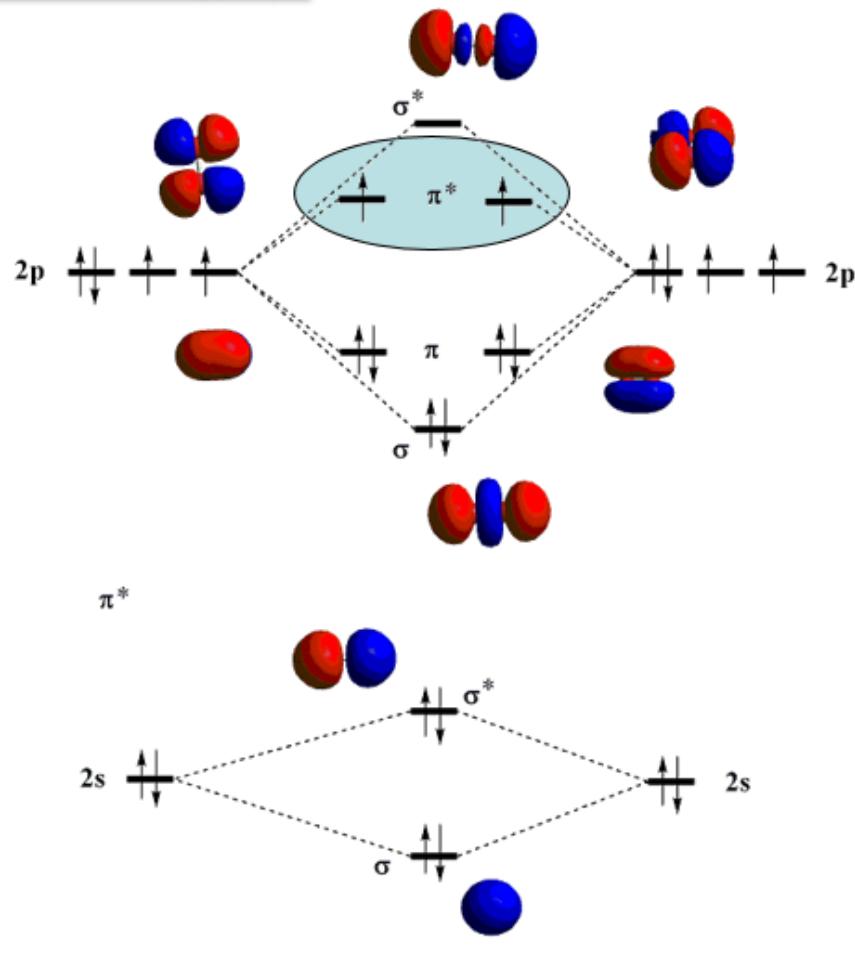
Text p.15  
(スピン量子数)

全スピン量子数の和  $S$

$S$	$N$
$0 \cdots$ 一重項	
$1/2 \cdots$ 二重項	
$1 \cdots$ 三重項	

$$\text{スピン多重度 } N = 2S + 1$$

# 三重項酸素



0……一重項  
 $\frac{1}{2}$ …二重項  
1…三重項

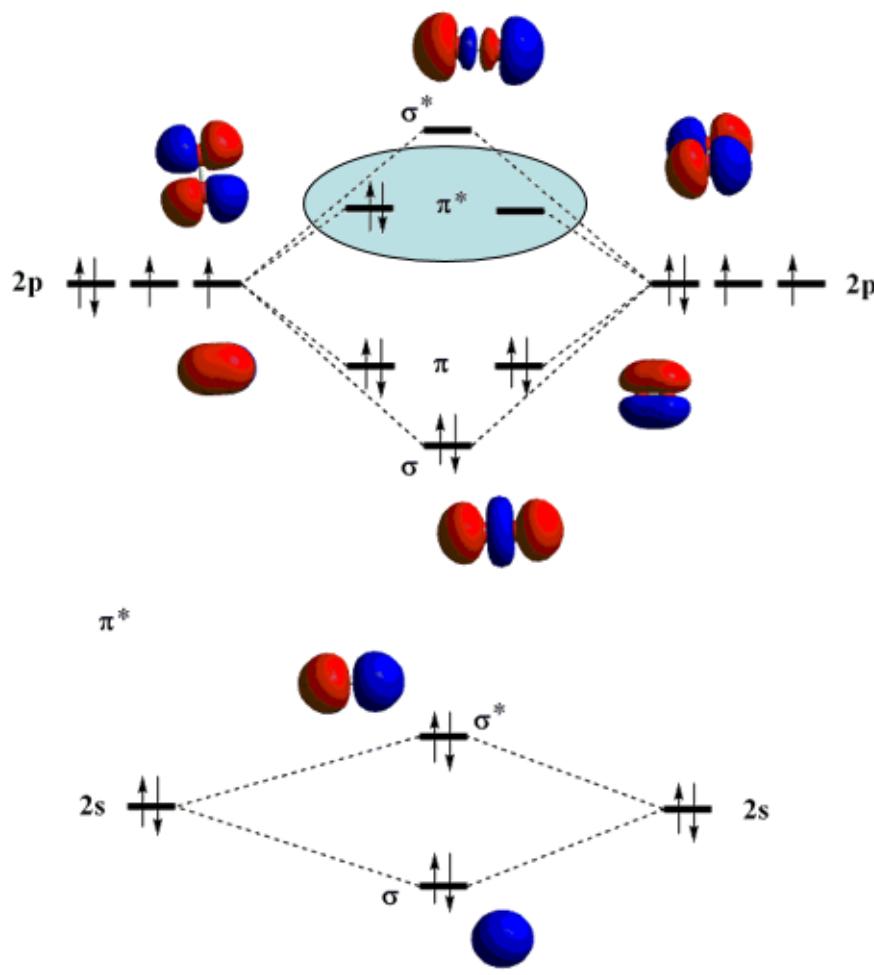
スピン量子数の和

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$



三重項酸素  
triplet oxygen

# 一重項酸素



0 … 一重項  
 $\frac{1}{2}$  … 二重項  
1 … 三重項

スピン量子数の和

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$$



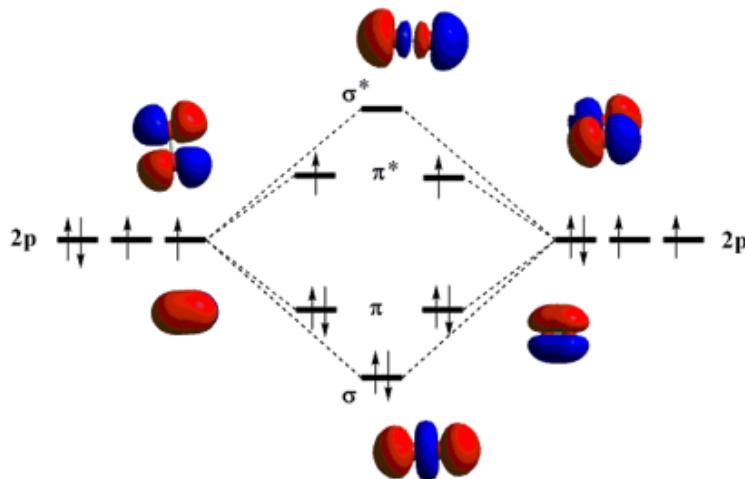
一重項酸素  
singlet oxygen

## 結合次数 (BO)

BO: bond order

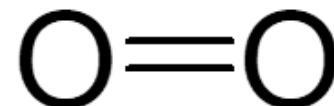
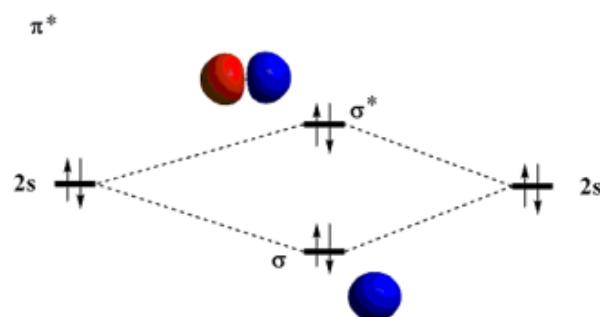
Text p.68

$$BO = \frac{1}{2} (\text{結合性軌道中の電子数} - \text{反結合性軌道中の電子数})$$



Triplet oxygenのbond order

$$\begin{aligned} BO &= \frac{1}{2} (6 - 2) \\ &= 2 \end{aligned}$$



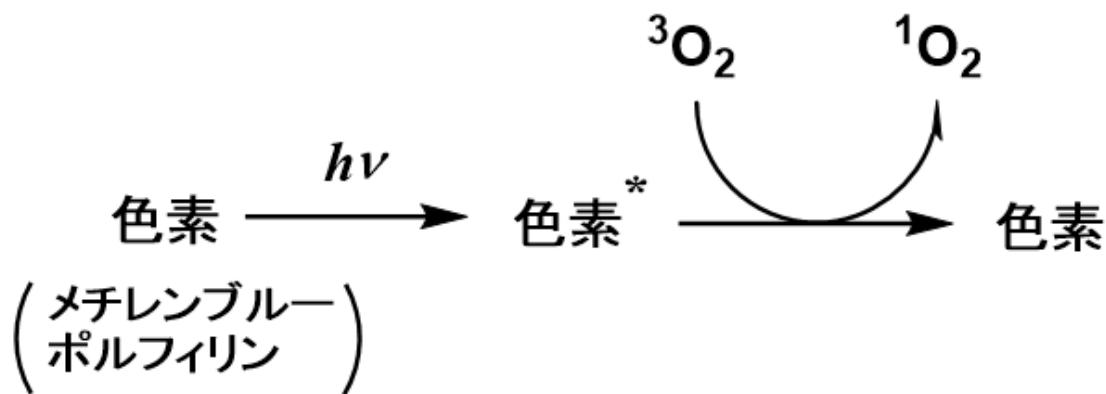
# 1. 一重項酸素 singlet oxygen ${}^1\text{O}_2$

Text p.184

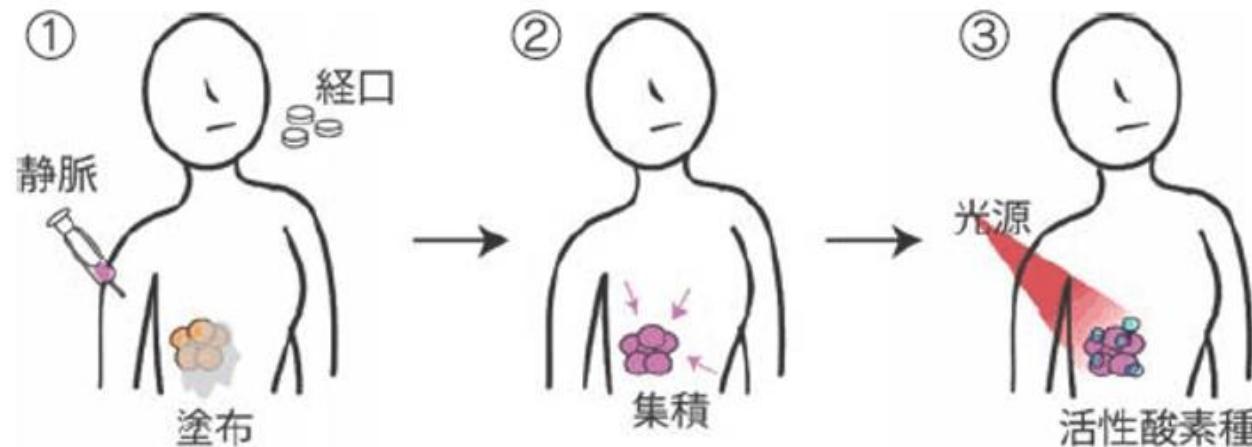
${}^1\text{O}_2$ は、 ${}^3\text{O}_2$ の $\pi^*$ 軌道の二つの不対電子が対をなす電子軌道をとり、より高いエネルギー状態

## 色素増感法

Text p.185



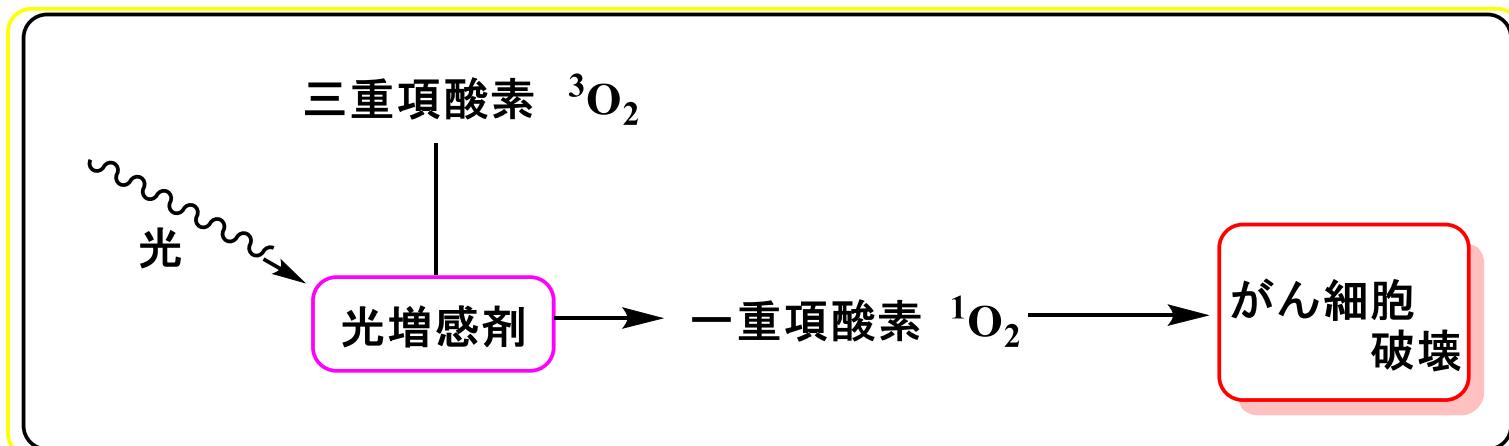
# 光線力学的療法(Photodynamic Therapy: PDT)



一般的な PDT の流れ。①治療目的に合わせて適切な薬物（光増感剤）を投薬し、  
②病理組織に光増感剤が集積されるまで暗室で待機する。

その後、③光源（主に、可視光～近赤外光）で患部を照射すると、励起状態の  
光増感剤が酸素と反応し高い酸化力をもつ活性酸素種が生成され、

有害組織を消去する。  
DOJIN NEWS:光線力学療法で発生する一重項酸素の視覚化のための  
蛍光プローブの開発 より  
<http://www.dojindo.co.jp/letterj/159/review/01.html>



## 実験室での製法

