

多糖間相互作用の分子動力学シミュレーションと細胞足場の作製

(横浜国大¹・モルプロセッシング²) ○飯島 一智¹・山崎 誠¹・矢部 誠²

Molecular Dynamics Simulation of Interaction between Polysaccharides and Fabrication of Cell Scaffolds (¹*Yokohama National University*, ²*Mol Processing*) ○Kazutoshi Iijima,¹ Makoto Yamazaki,¹ Makoto Yabe²

By forming a polyion complex, a water-insoluble material can be prepared from a highly water-soluble polysaccharide. In this study, molecular dynamics simulations on the process of formation of polysaccharide complexes from cationic polysaccharides and anionic polysaccharides were performed in order to elucidate the effects of the chemical structure of polysaccharides on the formation of polysaccharide complexes. The molecular dynamics simulation was performed using GROMACS ver. 2020.2. The 12 mer polysaccharides such as chitosan (CHI), heparin (HEP), chondroitin sulfate (CS), hyaluronic acid (HYA), and carboxymethyl cellulose (CMC) were used. As a result, it was shown that CHI and each anionic polysaccharide interacted and associated with each other. Interactions between polysaccharides were evaluated based on indexes such as the number of hydrogen bonds, radial distribution function, and exposed surface area of solvent. We will also introduce the fabrication of cell scaffolds of films and hydrogels from polysaccharide polyion complex nanoparticles.

Keywords : *Polysaccharide; Polyion Complex; Molecular Dynamics Simulation; Cell Scaffold*

カチオン性多糖とアニオン性多糖との間で形成されるポリイオンコンプレックスを用いることで、水溶性の高い多糖から水不溶性の材料を得ることができる。本研究では、カチオン性多糖とアニオン性多糖より多糖複合体が形成される過程について分子動力学シミュレーションを行い、各多糖の化学構造が複合体形成に与える影響について解析を行なった。分子動力学シミュレーションは GROMACS ver. 2020.2 を用いて行った。多糖はいずれも 12 mer とし、カチオン性多糖としてキトサン (CHI)、アニオン性多糖としてヘパリン (HEP)、コンドロイチン硫酸 (CS)、ヒアルロン酸 (HYA)、カルボキシメチルセルロース (CMC) を用いた。分子動力学シミュレーションの結果、CHI と各アニオン性多糖が相互作用し、会合する様子が確認された。水素結合数、動径分布関数、溶媒露出表面積などの指標をもとに詳細な解析を行なった。

多糖複合ナノ粒子を用いたフィルムおよびハイドロゲル型の細胞足場の作製と細胞培養についても紹介する。