ハイドロキシアパタイト結晶表面における各種アミノ酸のシミュレーションによる挙動解析

Behavior Analysis of single amino acid on Hydroxyapatite surface by Computational Simulation

みずほ情報総研[1]，阪大院工[2]，日大松戸歯[3]

○加藤 幸一郎[1]，橋本 彩[2]，福澤 薫[3]，民谷 栄一[2]

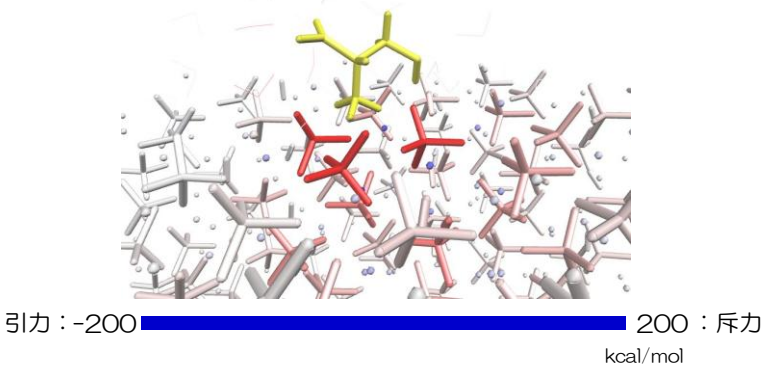
Mizuho Information & Research Institute, Inc.[1], Osaka Univ.[2], Nihon Univ.[3]

°Koichiro Kato[1], Aya Hashimoto[2], Kaori Fukuzawa[3] and Eiichi Tamiya[2]

E-mail: kouichiro.kato@mizuho-ir.co.jp

歯や骨の主成分であるハイドロキシアパタイト（HA）の結晶成長を理解・制御することは、骨形成過程の解明や優れたインプラント材料の設計において重要である。HA の結晶成長に関する研究事例としては、酸性タンパク質中の特定のアミノ酸配列が HA と強く吸着し結晶成長を制御可能な事が実験[1]により報告され、その吸着機構がシミュレーション[2]により解析されている。さらに、骨芽細胞の経時的な石灰化過程に対するラマン分光法による解析[3]も報告されており、培養組織中の HA から得られるラマンバンドが純物質である HA のものよりも低波数側へシフトする事が明らかとなった。そこで本研究では、上述のラマンバンドのシフトが HA 周辺に存在するタンパク質の影響によるものであると考え、数種のアミノ酸が HA に及ぼす影響についての解析をシミュレーションにより実施し、ラマン分光法の測定結果との比較を行った。

本発表では、Asp, Lys, Ser の 3 種のアミノ酸単量体の HA 表面における挙動や相互作用の詳細について、古典分子動力学法（MD）とフラグメント分子軌道（FMO)法を用いて解析した結果を報告する。今回の計算では、まず、3 つのアミノ酸に対して 4 種の初期構造（計 12 構造）を作成し、各々に対して 300K の MD を 10ns 実施する事で安定的な吸着構造を探索した。その後、MD によって得られた 10ns 時点の 12 種類の構造に対して FMO 計算により相互作用を解析したところ、アミノ酸の-NH_3^+と HA の PO_4^{3-}が強く相互作用しており、相互作用エネルギーの値においてはアミノ酸間の差異は小さい事が分かった。さらに、溶媒和の影響を評価するために MM/PBSA 計算も実施したところ、吸着に伴う水和自由エネルギーの変化が 3 種のアミノ酸で大きく異なる事が分かった。実験結果との比較も含め詳細を当日に報告する。



図：HA と Ser の相互作用の可視化

[1] G. He, T. Dahl, A. Veis and A. George, *Nature* **2**, 552-558 (2003)
[2] K. Kato, K. Fukuzawa and Y. Mochizuki, *Chem. Phys. Lett.* **629**, 58-64 (2015)
[3] A. Hashimoto, et. al. *Sci. Rep.* **5**, 12529 (2015)
[4] A. Hashimoto, et. al. *J. Raman Spectrosc.* **2014**, *45*, 157.

© 2016年 応用物理学会