

カルサイト／アパタイト結晶表面とペプチドの FMO 相互作用解析

Interaction Analyses between Calcite/Apatite and Peptides by FMO method

立教大理¹, みずほ情報総研², 星薬科大³, 東大生研⁴

畑田峻¹, 加藤幸一郎², 奥脇弘次³, 福澤薫³, 望月祐志^{1,4}

Rikkyo Univ.¹, Mizuho Information & Research Institute, Inc.², Hoshi Univ.³, Univ. Tokyo⁴

Ryo Hatada¹, Koichiro Kato², Koji Okuwaki³, Kaori Fukuzawa³, Yuji Mochizuki^{1,4}

E-mail: hatada@rikkyo.ac.jp

生物は自然界において、真珠・貝殻・骨・外骨格をはじめとしたバイオミネラルと呼ばれる鉱物を作り出す。また、作り出す作用をバイオミネラリゼーションと呼ぶ。バイオミネラルの多くは無機結晶と生体分子の複合構造であり、軽量で強靱な性質を有する機能性物質である。そのため、こうした複合体の構造制御への理解、とりわけ無機結晶への生体分子の吸着機構の理解はバイオミネラリゼーションの機構解明のみならず、新規機能性材料の設計にも貢献し得る。これまでに、我々はフラグメント分子軌道法 (FMO 法) を用いてバイオミネラルの 1 種であるカルサイトとその表面に特異的に吸着する DDGSDD モチーフ[1]の間の相互作用解析[2]、同様にハイドロキシアパタイトと ESQES モチーフ[3]の間の同解析[4]を行い、各残基ごとの吸着性が大きく異なり、C 末端側の残基が強く吸着している事を明らかにした。

今回は新たに両複合系を対象に、Pair Interaction Energy Decomposition Analysis (PIEDA) 解析を導入した FMO 計算により、結晶-ペプチド間の相互作用における各エネルギー成分の寄与を調べた。加えて、各残基と結晶表面のフラグメント間の相互作用エネルギーの抽出、各残基と結晶間の距離や配置に関する相関関係を検討した。さらに、上記の解析結果や残基の構造的特徴を特徴量として残基-結晶間の相互作用エネルギーの重回帰分析を行った。これらの結果を両複合系で比較したところ、カルサイト系では残基と近距離のフラグメントとの相互作用が、ハイドロキシアパタイト系では残基と距離が、残基-結晶間相互作用において最も寄与が大きい特徴量であることが分かった。また両系で共通してカルボキシ基の有無も重要な特徴量であることが示唆された。詳しい結果は当日報告する。

謝辞：本研究は、文科省ポスト「京」重点課題6、科研費(16H04635)から支援を受けた。

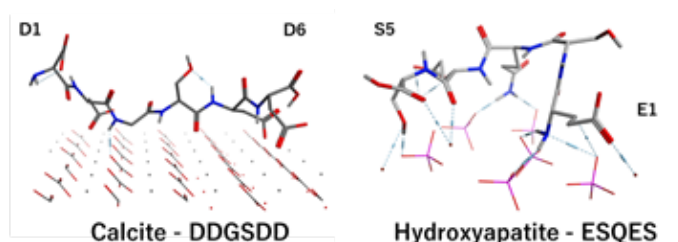


図1 カルサイト/アパタイトとペプチドの相互作用

[1] B-A. Gotliv et. al. ChemBioChem 6, 304 – 314 (2005)

[2] 加藤ら, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 (2018 名古屋国際会議場)

[3] G. He, T. Dahl, A. Veis, A. George, Nat.Mater. 2, 552-558 (2003)

[4] K. Kato, K. Fukuzawa and Y. Mochizuki, Chem. Phys. Lett. 629, 58-64 (2015)