

分子動力学シミュレーションを用いた生体親和性ポリマーブラシのマイクロダイナミクス解明

(北里大院理¹・九大院工²・九大先導研³・北里大理⁴・KISTEC⁵) ○露木 弘美¹・上田 智也²・西村 慎之介³・塩本 昌平³・村上 大樹^{2,3}・田中 賢^{2,3}・渡辺 豪^{4,5}

All-atom molecular dynamics simulation of biocompatible polymer brushes (¹Graduate School of Science, Kitasato University, ²Graduate School of Engineering, Kyushu University, ³Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University, ⁴School of Science, Kitasato University, ⁵Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology)

○ Hiromi Tsuyuki,¹ Tomoya Ueda,² Shinnosuke Nishimura,³ Shohei Shiimoto,³ Daiki Murakami,^{2,3} Masaru Tanaka,^{2,3} Go Watanabe^{4,5}

The biocompatibility is an essential property for the polymeric biomaterials to coat the surface of the medical equipments, such as extracorporeal membrane oxygenation (ECMO). It has been known that the biocompatibility of the biomaterials has a strong relationship with the dynamics of water molecules in contact with the surface of the materials. However, we have still not clarified the role of the surface water in the physical properties of the biomaterials. In the present study, we performed all-atom molecular dynamics simulation of the polymer brush of poly(2-methoxyethylacrylate) on the substrate and analyzed the dynamics of water molecules confined in the brush and closed to the surface. The analysis of the diffusion coefficients of water molecules confined in different domains of the brush indicates that the diffusion of the molecules gradually increased with the distance from the solid surface. Furthermore, the diffusion coefficients of water molecules at the water-polymer interface was smaller than that in the bulk.

Keywords : *Molecular dynamics simulation; Biocompatible materials; Polymer brushes; Surface water*

体外式膜型人工肺(ECMO)に代表される医療機器には生体親和性が求められるため、基材表面に生体親和性のポリマー材料をコーティングし、体内において異物として認識されることを防いでいる。これらの生体親和性材料では、タンパク質との吸着性と界面水の動態には密接な関係があると考えられているが、その詳細について完全には理解されていない¹⁾。本研究では、代表的な生体親和性材料であるPMEAを無機基板表面に一方向生長させたポリマーブラシに対して全原子分子動力学シミュレーションを行い、ポリマー内部や界面近傍、そしてバルクにおける水分子の動態について解析した。ポリマーブラシ内部を複数の領域に分割し、各領域における拡散係数を算出したところ、基板界面からポリマーの生長方向に離れていくにしたがい水の拡散が大きくなることがわかった。また、水-ポリマーブラシ界面近傍の水は、バルクの水と比較して、拡散係数が増加していることも明らかになった。

当日の発表では、タンパク質の吸着がポリマーブラシの構造や水のダイナミクスに与える影響についても報告する。

1) M. Tanaka *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2019**, 92, 2043-2057.