

アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2

Advanced Application of Fragment Molecular Orbital Method for Apatite Crystal #2

みずほ情報総研¹, 日大松戸歯², 立教大理³, 東大生産研⁴

○加藤 幸一郎¹, 福澤 薫^{2,4}, 望月 祐志^{3,4}

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

○Koichiro Kato¹, Kaori Fukuzawa^{2,4}, Yuji Mochizuki^{3,4}

E-mail: kouichiro.kato@mizuho-ir.co.jp, fullmoon@rikkyo.ac.jp

ハイドロキシアパタイト (Hydroxyapatite, HA) は骨や細胞などに対する高い親和性、骨の形成を促進する骨伝導性、タンパク質や脂質などを吸着する能力に優れる事などから、インプラントを中心とした生体材料として盛んな研究が行われている。より優れたインプラント材料の設計には HA の結晶成長を理解し、制御することが有用であると考えられる。これまでの実験研究によると、HA の結晶成長は Dentin Matrix Protein 1(DMP1)などの酸性タンパク質により制御が可能であり、DMP1 のアミノ酸配列中の“ESQES”、“QESQSEQDS”が重要な役割を果たしている事が報告されている[1]。一方、HA 結晶成長やペプチド吸着の微視的機構解明につながる様なシミュレーションによる研究はほとんど行われていない現状にある。そこで我々は、HA に対するフラグメント分子軌道 (Fragment molecular orbital, FMO) 法を用いた計算解析を進めてきた。FMO 法は、シリカ結晶表面に吸着したペプチドに対する大規模な量子化学計算事例も報告されている手法であり[2]、HA とペプチド間の相互作用解明に有効な手法である。

本発表では、水和環境下での HA 表面への“ESQES”吸着に関する FMO 計算解析の結果を報告する。古典分子動力学法による構造サンプリングを実施する事で構造揺らぎを考慮し、計 30 構造に対する FMO 計算を実施したところ、いずれの構造においても末端の“S”が最も強く吸着に寄与しており、HA との電荷の授受が吸着に深く関与していることが分かった。静電相互作用だけでなく、量子化学計算により議論が可能となる電荷の授受の重要性が明らかとなった。

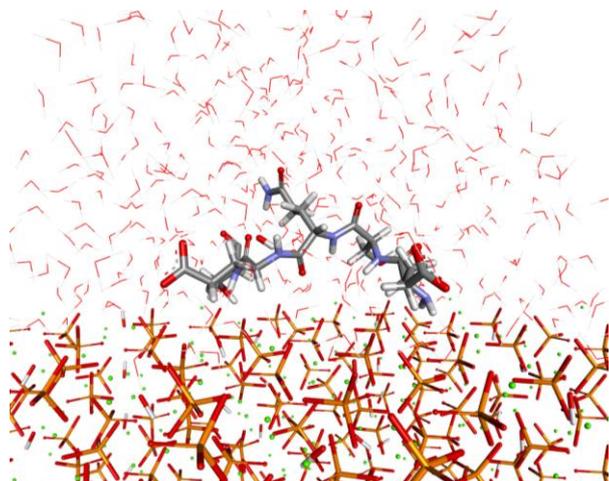


図 1 水和環境下でのアパタイトへの ESQES 吸着構造

【謝辞】本研究開発は「HPCI 戦略分野 4 次世代ものづくり」、並びに「立教大 SFR」から支援を受けている。

- [1] G. He, T. Dahl, A. Veis and A. George, *Nature* 2003, **2**, 552-558
- [2] Y. Okiyama, T. Tsukamoto, C. Watanabe, K. Fukuzawa, S. Tanaka and Y. Mochizuki, *Chem. Phys. Lett.* **566**, 25-31 (2013)