

<記者用説明文>

樹脂表面を人や環境に優しい材料に変える生体分子を計算機上で設計

(株)日立製作所 研究開発グループ 岩崎富生 ☎070-4209-2392

東京工業大学 物質理工学院 芹澤武

学会発表番号 1PD54

<研究成果のポイント>

- 樹脂表面を生体適合化・環境適合化させる生体分子を計算科学・情報工学で設計
 - 樹脂と生体分子の接着強度を高精度予測できる分子シミュレーション技術を開発
- <研究成果の概要>

人や環境に優しい生体材料であるペプチドで表面を覆うことで、触れても炎症を起こしにくい材質に変えることができる。本研究では、樹脂表面への接着性が高い表面コートに適したペプチドの探索を目指した。分子シミュレーションによって接着強度を予測することで、強く接着する新規なペプチドを設計し、実験によって試作・接着性評価をおこなった。これにより、過去に評価したどのペプチドよりも接着性が高いことを実証した。本技術は、体内埋め込み型医療用デバイスのケース用樹脂に、ペプチドを接着して生体適合化させ、炎症を起こしにくくするなどの実用化が期待できる。

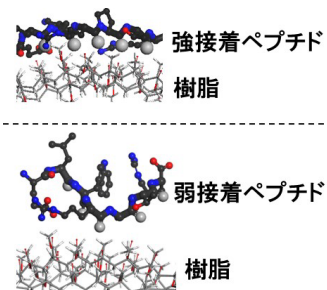


図1 樹脂と生体分子であるペプチドの接着強度計算

<研究成果解説文>

樹脂表面を人や環境に優しい材料に変える生体分子を計算科学と情報工学により設計

第29回ポリマー材料フォーラム 予稿集 P109

著者名：岩崎富生^{1*}、丸山優史¹、丹羽達也²、澤田敏樹²、芹澤武²

著者所属

1. 日立製作所 研究開発グループ
2. 東京工業大学 物質理工学院

* E-mail: tomio.iwasaki.ka@hitachi.com

樹脂表面に生体適合性・環境適合性をもたせるために、天然の生体分子であるアミノ酸を並べたペプチドを、樹脂表面に接着させる検討をした。ここでは、ポリメチルメタクリレート樹脂(PMMA)を例に、樹脂との接着性に優れたペプチド配列(アミノ酸配列)を、分子シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクスを融合させて設計した。シミュレーションでは、量子力学に基づいて剥離エネルギーを計算することで接着性を評価した。実験においては、この剥離エネルギーを表面プラズモン共鳴法により測定し、計算値と比較した。12種類のアミノ酸配列に対して、剥離エネルギーの計算結果と実験結果の相対差は6%以内となり、計算手法の妥当性が確認できた。また、これらのデータをインフォマティクスのコア技術である応答曲面法により分析するとともに、原子配置を解析した。この結果、PMMA樹脂と強接着させるためには、N末端から数えて奇数番目のアミノ酸としては、PMMA樹脂のメチルエステル(CH₃CO-)基との吸着性が高いアミノ酸(W、R、E)が有効であり、偶数番

目のアミノ酸としては、PMMA樹脂のメチル(CH₃-)基との吸着性が高いW、Rが有効との設計指針が得られた。また、N末端から5番目に立体構造をもつP(プロリン)を配置することで、ペプチド構造を安定化させて接着性を強くできるという指針を見出した。以上の指針を満たすペプチド(RWWRPWW、RWRRRWW、EWRPWR、RWRPWR)を実験的に試作・評価した結果、高い接着性を確認できた。

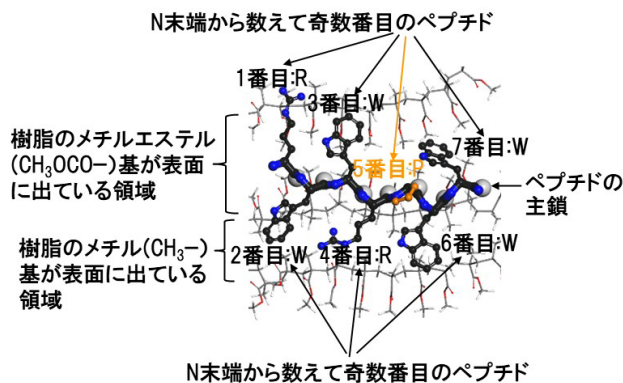


図1 設計した強接着ペプチド(表面を上から見た図)