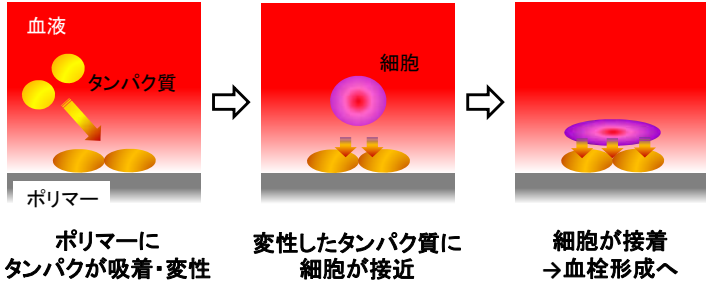


分子動力学シミュレーションによる 生体適合性ポリマーと水の相互作用解析

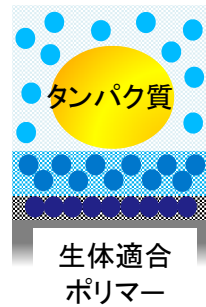
医療材料に用いられるポリマーの生体適合性にはポリマーと相互作用する水が重要な役割を果たしています。水の挙動解析は生体適合性の高いポリマーの開発・設計への指針の獲得に欠かせない情報です。今回は、シミュレーションによるポリマーと水の相互作用解析を紹介します。

1. 生体適合性ポリマーと水

人工臓器などでの血栓の形成過程



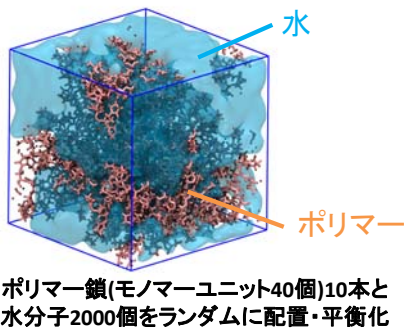
水とポリマーの相互作用
弱
強



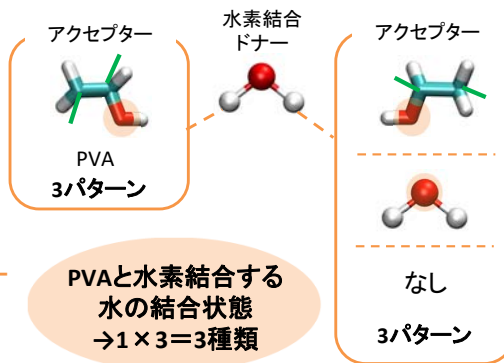
ポリマーとの相互作用で水を3種に分類
↓
中間水・不凍水がタンパク吸着に影響

2. 分子動力学(MD)シミュレーションによる解析

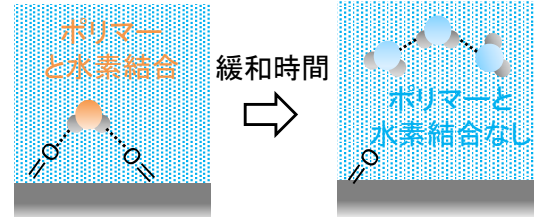
ポリマー鎖と水の系をシミュレーション



①水素結合のアクセプター先で水分子を分類 ②水素結合状態変化にかかる緩和時間で、水の動的挙動を分析



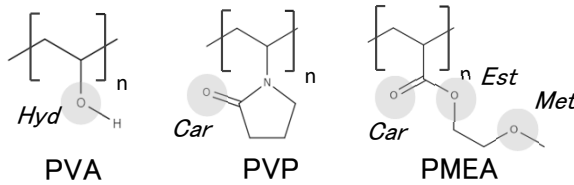
水の動的挙動を分析



- 3種類のポリマーで①②を実施。
- 各ポリマーと水素結合する水の結合状態の数・種類・動的な振る舞いを分析。

3. MDシミュレーションの結果・実験との比較

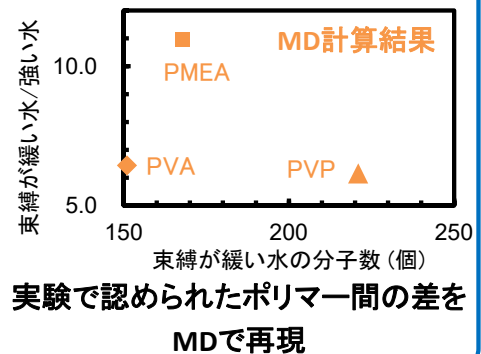
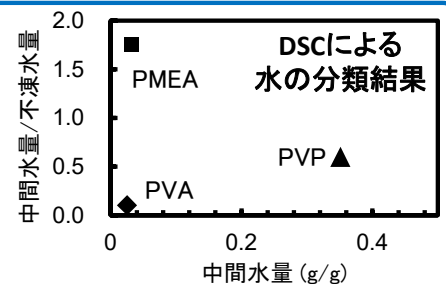
- 20 nsのMDのデータを使用。
- 緩和時間(ps)の長さ(ポリマーからの束縛の強さ)によって水の結合状態を3種類に分類。



No: 水素結合先なし、Wat: 水の酸素原子

PVA		PVP		PMEa	
結合状態	緩和時間	結合状態	緩和時間	結合状態	緩和時間
(Hyd, Hyd)	830	(Car, Car)	2052	(Met, No)	2763
(Hyd, No)	168	(Car, No)	459	(Car, Met)	2093
(Hyd, Wat)	32	(Car, Wat)	44	(Car, Car)	1732
				(Car, No)	550
				(Car, Wat)	37
				(Met, Wat)	14

ポリマーからの束縛が強い(不凍水に影響)
ポリマーからの束縛が緩い(中間水に影響)



MDシミュレーションを用いることで、リアルでの実験無しに、高分子での溶媒分子の振る舞いが予測可能。候補材料探索のスピードアップにMDシミュレーションは強力なツールとなります。