

公益財団法人富山第一銀行奨学財団  
理事長 金岡 純二 殿

## 助成研究成果概要報告書

教育機関名 : 富山大学	助成金額 :	800 千円
研究代表者 : 石山 達也	所属 : 大学院理工学研究部 (工学)	職位 : 准教授
研究題目 : 生体適合性高分子の分子構造研究		

## 研究概要

眼球における水晶体の代替を担うソフトコンタクトレンズ、腎臓機能の代替を担う中空糸型血液透析器など、我々にとって医療材料は不可欠である。一方、そこで用いられる高分子材料がタンパク質などの生体物質を吸着することによって拒絶反応を誘起するようなことがあってはならない。ここで、材料の生体物質接着抑制能を「生体適合性」とよぶことにすると、生体適合性が高い材料と低い材料とで何が異なるのかという疑問が生じる。この問題を分子レベルで突き詰めていくと、高分子材料と生体物質との相互作用の他に、材料と接触している水の溶媒和殻の安定性が生体物質の接着に深く関係していることがわかる。つまり、安定な溶媒和殻を作るかどうか材料によって異なるために生体適合性に違いが生じると考えられ、その根本理解には高分子材料界面に接する水構造を解明する必要がある。本研究は、現在生体適合性が高いといわれているアクリレート系高分子 PMEA[poly (2-methoxyethyl acrylate)]と水界面の分子シミュレーションを行い、界面水構造、あるいはスペクトルを理論的に解明することを目的となされるものである。スペクトル計算を含めた高分子/水界面の分子シミュレーションは、世界的にも他に類をみないため、大変インパクトの大きい研究となることが期待される。

## 成果要約

含水された PMEA 中の水は、通常の水とはかなり異なる挙動を示すことがシミュレーションにより明らかになった。水は高分子マトリックス中で、カルボニル酸素などの官能基にトラップされており、それが高分子のガラス転移温度近傍で官能基から離脱し自由に動き回る挙動が観測された。生体適合の観点でこのことを理解すると、高分子はタンパク吸着を行う上で、高分子上の水分子を排除せねばならないが、この吸着水の結合が、高分子の運動性に関わるガラス転移温度と強い相関があることが計算により明らかになった点は大きな意義がある。通常、高分子と水との相互作用エネルギーは、水とカルボニル酸素などの官能基との結合エネルギーだけで説明できると考えられがちであるが、実際には高分子側の運動がかなり関与していることは予想しなかった発見である。特に、PMEA のみならず、アクリレート系高分子の側鎖の長さを変化させると生体適合性が変化するという報告がなされているが、側鎖の長さとガラス転移温度には強い相関関係があることが知られている。従って、「側鎖の長さ」と「生体適合性」には強い相関関係があることになる。今後は、様々な長さの側鎖をもつ高分子のシミュレーションを行い、水がトラップされた状態から離脱状態に至る過程をシミュレーションにより解明していく予定である。

<p>研究成果 発表状況</p>	<p><b>【雑誌論文、学会発表、図書、新聞掲載、作成 Web ページ、特許権等の出願・取得状況】</b></p> <p>学会発表          固体高分子中で形成される水構造と振動スペクトルの解析          八十島亘宏、石山達也          第 31 回分子シミュレーション討論会、306S (+ 122P)          金沢、2017 年 11 月 29 日</p>		
<p>経費の 執行状況</p>	<p>区 分</p>	<p>執行額 (円)</p>	<p>備 考</p>
<p><b>【物品費】</b></p>			
<p>計算サーバ</p>		<p>500,000</p>	
<p>ノート PC</p>		<p>199,800</p>	
<p>ソフトウェア</p>		<p>30,000</p>	
<p>フリクションボール替芯 その他</p>		<p>300</p>	
<p><b>【旅費】</b></p>			
<p>日本化学会春季大会</p>			
<p>日本大学船橋キャンパス</p>		<p>54,900</p>	
<p><b>【謝金】</b></p>			
<p><b>【その他】</b></p>			
<p>学会参加費 日本化学会</p>		<p>15,000</p>	
<p>合計</p>		<p>800,000 円</p>	