

研究タイトル:

## 分子シミュレーションを用いた生体適合性に関する研究



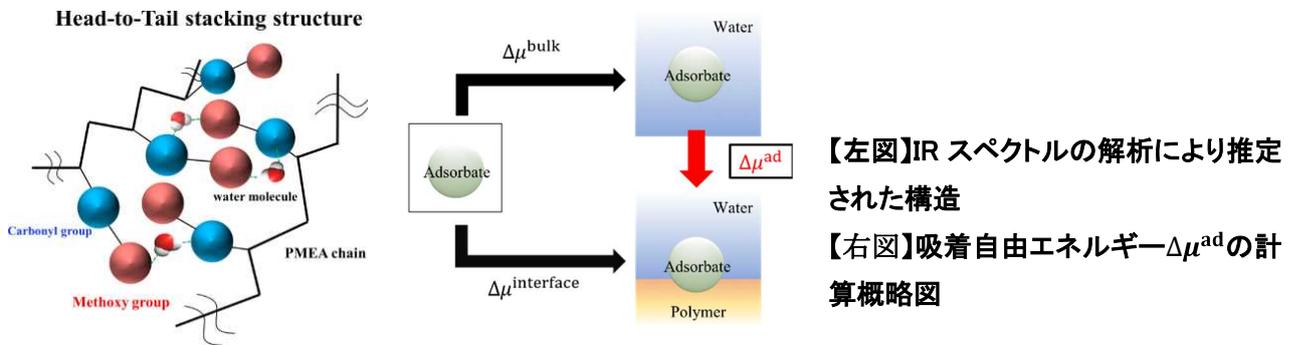
氏名:	八十島 亘宏 / YASOSHIMA Nobuhiro	E-mail:	yasoshi@toyota-ct.ac.jp
職名:	助教	学位:	修士(工学)
所属学会・協会:	分子シミュレーション学会, 分子化学会, 理論化学会 他		
キーワード:	分子動力学, 高分子, 生体適合性, 吸着, 自由エネルギー, タンパク質, アミノ酸, 機械学習		
技術相談 提供可能技術:	<ul style="list-style-type: none"> <li>・Gromacs 環境における分子動力学シミュレーション技法</li> <li>・IR スペクトルを計算するプログラミング技術</li> <li>・ERmod 開発環境下での自由エネルギー計算手法</li> </ul>		

### 研究内容: 生体適合性に関する分子動力学シミュレーションと機械学習によるアプローチ

我々の社会には様々なポリマー材料が使用されているが、中でも医療の現場で用いられるバイオマテリアルは生命活動の維持に極めて重要である。バイオマテリアルにおいて必須となる「生体適合性」は主に血小板吸着量の多寡から判定されるが、優良な結果を見出すポリマー構造の規則性は解明されていない。そこで、分子動力学シミュレーションまたは機械学習によるアプローチによって「生体適合性」が高いポリマー構造の規則性を見出す研究を行っている。

#### 1. Poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA)に関する分子動力学シミュレーション

PMEA は類似構造に比べて生体適合性が著しく高い高分子であり、血液と接触する医療器具に幅広く用いられている。そこで、分子動力学シミュレーションを用いて PMEA が持つ特異性を解明する研究を行っている。これまでには、含水 PMEA における IR スペクトルの実験結果をシミュレーションによって再現し、そのスペクトル形状を作り出す PMEA の官能基および構造を解明した。また、実際にアミノ酸やタンパク質を吸着させるシミュレーションを行い、吸着時の自由エネルギーを計算することで、PMEA が吸着しにくい(生体適合性が高い)原因の追及を行っている。



#### 2. 血小板吸着量を予測する機械学習アプローチの開発

分子シミュレーションによって蓄積されたデータを活かして、血小板吸着量を予測するという現実的な課題への応用を目指している。しかしながら、分子シミュレーションでは時空間領域の小ささにより血小板吸着を直接シミュレートすることは困難である。したがって本研究では、機械学習によってポリマー側鎖構造をカテゴライズさせ、複雑な機構によって吸着が進行する血小板吸着量についての予測および重要因子の抽出を可能とするアプローチを開発している。

#### 提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	