

金属材料の表面特性  
Surface properties of porous metals

京都大学大学院エネルギー科学研究科 袴田昌高

研究成果概要

ナノポーラス金は、表面に多数の格子ひずみを有する多孔質材料であり、その特異な表面電子状態やトポロジーにより、接着性細胞の生理的機能・活性に多様な影響を及ぼすことが明らかにされている<sup>1)</sup>。例えば、大腸菌に対して強い抗菌性を示し<sup>2)</sup>、一方で上皮癌(HeLa)細胞に対しては自発死(アポトーシス)シグナルを誘導することが示された<sup>3)</sup>。さらに、間葉系幹細胞の接着率を低下させ、分化や増殖に影響を及ぼすことも明らかにされている。細胞は、細胞外マトリクス(ECM)を介してナノポーラス金に接着するため、ECMの吸着挙動は細胞接着に強い影響を及ぼす。そこで、分子動力学(MD)計算を実行し、コラーゲン分子の吸着ダイナミクスの解明を試みた。

Type-1 ヒトコラーゲン分子のアミノ酸配列をもとに、60 残基×3 鎖を取り出したコラーゲン分子断片(CMS)モデルを作成した。本モデルは細胞接着標的となる GFOGER(グリシン-フェニルアラニン-ヒドロキシプロリン-グリシン-グルタミン酸-アルギニン)アミノ酸配列を中央に有している。ナノポーラス金表面モデルとして、平滑金(111)面に対して5%の圧縮格子ひずみを加えた6原子層厚モデルを定義した<sup>1-3)</sup>。また、分極効果をポテンシャルに取り入れるため、仮想電子を有する誘起双極子金表面モデルを使用した。作成したCMSを各金モデル上に配置した後、TIP3P水分子)とカウンターイオンを付加して、MD計算を時間刻み2fsで50ns間実行した。MD計算ではNAMDを用いた。MD計算の結果から、吸着率・エネルギーや基準振動モード解析を行った。

ナノポーラス金上にて、吸着に関与するアミノ酸残基が増えた一方で、吸着率・エネルギーが平滑金よりも低下した。この結果は、ナノポーラス金上で複数の残基が吸着/脱着を繰り返した結果であることが示唆された。そこで基準振動解析を実施したところ、ナノポーラス金上ではねじれや局所的な横波振動といった協調性の低いダイナミクスが支配的であることがわかった。このような低協調運動は、吸着の安定性を著しく低下させ、細胞接着モチーフ(GFOGER)の構造を大きく歪曲させた。また、ナノポーラス金表面の格子ひずみは、アミノ酸吸着サイトを変形させるため、多くの荷電アミノ酸残基の吸着が不安定化し、表面上でふらつく様子が観察された。以上より、ナノポーラス金特有の格子ひずみによる分極効果だけでなく、格子配置の乱れに基づくトポロジカルな影響がCMSの吸着ダイナミクスに強い影響を及ぼすことが示された。実験結果の裏付けとして、CMSのねじれ、振動等の低協調運動が誘発された結果、細胞の安定な接着が阻害されると考えられる。

参考文献：1) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **8** (2018) 3870.

2) N. Miyazawa et al., *Sci. Rep.* **9** (2019) 1091.

3) S. Deguchi et al., *Materialia* **7** (2019) 100370.

発表論文： S. Deguchi et al., *Mater. Sci. Eng. C* **119** (2021) 111461.