

研究タイトル：

機器分析とシミュレーションを組み合わせた分子の構造解析研究

氏名：	水島 美咲 / MIZUSHIMA Misaki	E-mail：	m-mizushima@fukui-nct.ac.jp
職名：	助教	学位：	修士(工学)
所属学会・協会：	高分子学会、日本核磁気共鳴学会、繊維学会		
キーワード：	構造解析、分子シミュレーション、生体高分子、繊維		
技術相談 提供可能技術：			



研究内容：シルクフィブロイン『微量アミノ酸領域』についての構造解析研究

カイコが作り出すシルクタンパク質の一つ、フィブロインは驚異的な機械的特性を有している。近年、日本の伝統的な繊維材料の一つでもあるシルクは国内衣料需要が減少傾向にある中で、その優れた機械的特性(強靱性や生体適合性、生分解性など)が注目され医療材料などに応用されている。またフィブロインは化石燃料由来でないことやカイコは熱や有機溶媒を使わない紡糸技術を有することから、優れたサステナブル/低エネルギー材料としても期待されている。しかし、カイコの紡糸やフィブロインの詳細構造については未だ完全には解明されていない。

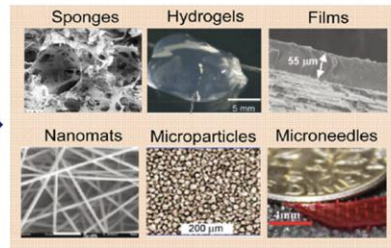
フィブロインタンパク質は一次構造から、主にグリシン-X(アラニン/セリン or チロシン/バリン)の繰り返し領域と非晶領域に区別されている。アミノ酸の中でもグリシン、アラニン、セリンは比較的存在割合が多く、これまでこの『グリシン-アラニン/セリン』領域の構造解析が積極的に進められてきた。しかし、シルクの詳細構造の解明のためには、微量アミノ酸を含む『グリシン-チロシン/バリン』領域の構造解明が不可欠である。

シルクフィブロイン



- ✓ 強靱性
- ✓ 生体適合性
- ✓ 生分解性
- ✓ 成形加工性
- ✓ 化石燃料由来でない
- ✓ 熱や有機溶媒を使わない

サステナブル/低エネルギー材料

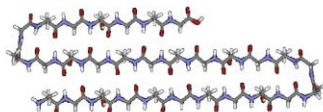


L.-D.Koh et al, Progress in Polymer Science 46, 86-110(2015).

一次構造：繰り返し領域(グリシン-X) + 非晶領域



X=アラニン/セリン領域



グリシン-アラニンモデル→ラメラ構造



未解明

微量アミノ酸領域(X=チロシン/バリン)

- 詳細構造？
- アミノ酸存在位置？
- 構造転移メカニズム？

そこで本研究では、微量アミノ酸『グリシン-チロシン/バリン』領域の構造解明を目指し、NMR などの機器分析と分子シミュレーションを用いた実験と理論を組み合わせた構造解析研究を行っている。

実験によって実測値を得るだけでなく、シミュレーションによってフィブロインなどの生体高分子の理論モデルの構築や実測値と対応する理論値を計算で得ることで実測値を補完し、より最適なモデルの構築を実現する。

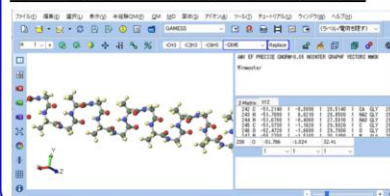
フィブロイン(液状絹/繊維)について実験



- 酵素実験
- NMR測定
- 他機器分析



コンピュータシミュレーション



- 理論モデル構築
- 最適化
- 機器分析理論値計算