

(京大院工) ○梶並信彦, 松本充弘

E-Mail to Nobuhiko Kajinami: kajinami.nobuhiko.82a@st.kyoto-u.ac.jp

キーワード: トライボロジー 関節軟骨 高分子ブラシ

1. はじめに

人間の膝関節は高荷重、低相対速度という厳しい条件において非常に滑らかに動くことができる。これは、関節を構成する骨の先端を覆っている関節軟骨によるものであり、二つの関節軟骨間の動摩擦係数は約 0.001 と非常に低い値をとる [1]。より優れた人工関節の作成のためにはこの低摩擦機構のメカニズム解明が重要であり、様々な視点からの議論がされてきたが [2]、ナノスケールでの理解は十分には成されていない。近年、軟骨の構成物質の一つであるプロテオグリカンの役割が注目されている。この物質は凝集し、一部分がポリマーブラシを形成して、関節軟骨表面に存在していると考えられている [3]。本研究では、このポリマーブラシの役割に注目する。ポリマーブラシおよび滑液（関節間に存在する潤滑流体）が摩擦挙動に与える影響を調べるために、全原子モデルを作成して、分子動力学法を用いて解析した。

2. 計算モデル

本研究では、原子同士の相互作用として、DREIDING force field [4] を採用している。計算には、LAMMPS [5] を用いた。

関節軟骨に存在するポリマーブラシ系は、様々な高分子から構成された非常に複雑な構造を持つ [6]。計算の簡略化のために本研究では、ポリマーブラシ、滑液、関節軟骨表面の 3 つの要素からなるモデルを作成した。特にポリマーブラシのモデリングに関しては、その重要な構成要素の一つであるコンドロイチン 6 硫酸 (C6S) に注目した。C6S からなる重合度 8 の高分子を作成し、9 本ずつ $73.6 \times 73.6 \text{ \AA}^2$ の大きさの上下の壁面に、その末端粒子を固定した。なお弾力のある軟骨表面の構造を再現するために、ばねによる復元力が作用するように固定している。壁面のモデリングには、水分子を等間隔に配置して、ポリマーブラシと同様の方法でその酸素原子を固定している。また、滑液のモデリングに関しては、滑液の主成分である、水分子や Na^+ , Cl^- といった無機電解質、そしてヒアルロン酸を採用している。

3. 計算結果

298K で平衡化した後、上の壁面を一定速度 (500 m/s) で並進運動させてずりを加えた。平衡状態における計算系のスナップショットの例を Figure 1 に示す。また、参照系としてポリマーのない、滑液のみのモデルを作成して同様の計算を行った。計算結果から壁面に作用する荷重と摩擦力を求めて動摩擦係数を評価した。参照系の場合、0.07 程度あった動摩擦係数が、ポリマーのあるモデルにおいては 0.03 程度に減少した。このメカニズムを調べるために、滑液の流速プロファイルを作成した。この結果を Figure 2 に示す。図より、参照系でのクエット流れとは大きく異なる流れが生じており、上下の壁

面付近でポリマーによって、流れが大きく妨げられていることが分かる。壁面付近でのこの速度勾配の減少が摩擦低減に大きく貢献していると考えられる。

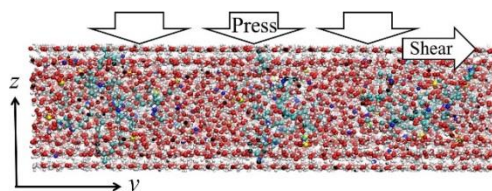


Figure 1 平衡状態におけるスナップショットの例

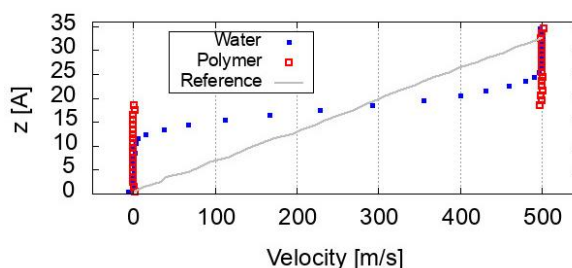


Figure 2 定常状態における流速プロファイル

4. 結言

本研究では、関節軟骨表面におけるポリマーブラシおよび滑液が関節の潤滑や摩擦特性に与える影響について調べるために、ナノスケールのモデルを構築し、シミュレーションを行った。その結果、ポリマーによる壁面付近での局所的な流体の速度勾配の減少が、摩擦低減の役割を果たしていることが分かった。

参考文献

- [1] V. C. Mow et al., "Mechanics of animal joints", *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 11, pp. 247-288 (1979).
- [2] D. Dowson, "Bio-tribology", *Faraday Discuss.*, Vol. 156, pp.9-30 (2012).
- [3] J. Klein, "Polymers in living systems: From biological lubrication to tissue engineering and biomedical devices", *Polymers Adv. Tech.*, Vol. 23, pp. 729-735 (2012).
- [4] B. D. Olafson et al., "Dreiding: A generic force field for molecular simulations", *J. Phys. Chem.*, Vol. 94, pp. 8897-8909 (1990).
- [5] <http://lammps.sandia.gov/>
- [6] D. Heinegard et al., "Ploteoglycans : an overview", *Methods Enzymol.*, Vol. 144, pp. 305-372 (1987).
- [7] W. L. Jorgensen, et al., "Comparison of simple potential functions for simulating water", *J. Phys. Chem.*, Vol. 78, pp. 926-935 (1983).