

**<講演>7. 歯質表面におけるフッ化物生成反応の機構  
: フッ化物生成反応のコンピュータシミュレーション  
(東日本学園大学歯学会第8回学術大会(平成2年度  
総会))**

著者名(日)	三浦 宏子, 荒木 吉馬, 山根 由朗, 上田 五男, 井藤 信義, 大野 弘機
雑誌名	東日本歯学雑誌
巻	9
号	1
ページ	52
発行年	1990-06-30
URL	<a href="http://id.nii.ac.jp/1145/00007523/">http://id.nii.ac.jp/1145/00007523/</a>

## 7. 歯質表面におけるフッ化物生成反応の機構 —フッ化物生成反応のコンピュータシミュレーション—

三浦宏子,<sup>1)</sup> 荒木吉馬,<sup>2)</sup> 山根由朗,<sup>2)</sup>  
上田五男,<sup>1)</sup> 井藤信義,<sup>1)</sup> 大野弘機,<sup>2)</sup>  
(口腔衛生,<sup>1)</sup> 歯科理工<sup>2)</sup>)

フッ化物局所応用における抗う蝕効果は、フッ化物処理液と歯面との反応によって生じた表層の物理的、化学的性質に依存するものと考えられる。歯質とフッ化物溶液との反応は、液の pH および共存イオンの種類、濃度によって生成物の種類・生成量が変化する複雑な塩生成反応である。本研究では、この反応機構を化学量論的に明らかにするために、カルシウム、リン酸、フッ素を含む反応について、熱力学的条件等を考慮して反応のコンピュータシミュレーションを行なった。同一条件で生成実験を行ない、その過程を pH メータによって追跡するとともに、生成した結晶の分析 (X線回折, 赤外線吸収スペクトル, SEM 観察) を行なった。

計算結果と実験的に得られた生成物の収量および反応過程における pH 変化等の結果とは良く一致しており、本プログラムによる理論計算によって、フルオロアパ

イト (FAp) 生成反応がほぼシミュレートできた。過飽和度および生成温度は、計算値ないしは実験値にほとんど影響を与えなかった。X線回折による生成結晶の分析では、pH4.0と4.7において純粋な FAp に近く結晶性も良好であった。pH5.7では結晶性が著しく低下し、pH3.5では格子定数が FAp とは若干ずれを生じていた。FAp のリン酸根に基づく赤外スペクトルにおいても、pH によって差が認められた。特に1000cm<sup>-1</sup>付近での非対称伸縮と600cm<sup>-1</sup>付近での面外変角に顕著な差が認められた。SEM 観察では、pH4.0以上の酢酸緩衝液と pH3.5以下の乳酸緩衝液中では、結晶粒子の形がかなり異なっており、明らかに結晶の成長の仕方に差があった。これは共存イオン種の影響が表われたものだと考えられる。以上の生成物の分析から、pH4.7付近が最も良好な FAp 生成条件であることが明らかになった。

## 8. う蝕自然発症ラットの研究 —X線回折法によるエナメル質の結晶性の評価—

原口克博,<sup>1)</sup> 三浦宏子,<sup>2)</sup> 荊木裕司<sup>1)</sup>  
松田浩一,<sup>1)</sup> 上田五男,<sup>2)</sup> 井藤信義,<sup>2)</sup>  
(歯科保存II,<sup>1)</sup> 口腔衛生,<sup>2)</sup>)

演者らは、う蝕の病因を解明する目的でう蝕自然発症 (SDC) ラットとその対照系 (CSC) ラットを用いてう蝕の発症要因のうち特に、宿主要因について研究を行い、既に両系統の形態学的差異のあることを第6回本学会で報告した。

そこで今回は、X線回折を用いてラットエナメル質の結晶性について調べたところ若干の知見を得たので報告した。

### 結果および考察

両系統の生後1, 2, 3, 4ヶ月のエナメル質では、いずれもハイドロキシアパタイトに特有の(222), (300), (112), (211)のX線回折像が認められた。しかし、両系統間には大きな差が認められなかった。さらに、生後1ヶ月の(310)および(002)の回折線を部分拡大した

line profile の重ね合わせでは、CSC ラットと SDC ラットの(310), (002)ともにハイドロキシアパタイトのそれと若干のずれを認めた。生後3, 4ヶ月のX線回折像では、生後1, 2ヶ月に比べて、11.6度と20.6度付近に新たに回折線が出現した。この原因については、今後検討する予定である。生後3ヶ月の(310)および(002)の回折線を拡大した line profile の重ね合わせでは、(002)でハイドロキシアパタイトの回折角に近似した。格子定数では、SDC ラットと CSC ラットで a 軸および c 軸では、ほとんど差は認められなかった。半価幅では、両系統で加齢により半価幅は小さくなり、結晶性が良くなっていることが認められた。SDC ラットと CSC ラットの半価幅において、生後2, 3, 4ヶ月で差が認められた。さらに、結晶子の大きさにおいて CSC ラット