

A03-002 生体膜におけるメソ構造の非平衡ダイナミクス

首都大学東京・大学院理工学研究科 好村滋行
東京大学・物性研究所 野口博司
東京大学・物性研究所 芝 隼人

我々は生体膜が多成分系であることに着目して、相分離や流体力学的相互作用、ブラウン運動という純粋に物理的な現象を通じて、多彩な生体膜の振る舞いを理解しようとしている[1, 2]。平成25年度には、具体的に以下の研究成果を得た。

(1) ベシクル上のドメインの成長則[3]

生体膜上の相分離にともなうドメイン成長は、近年、実験的にも理論的にも調べられつつある。これまでの理論的な取り扱いでは、無限に広い二次元膜を考えていたが、実験的には閉じたベシクル上での相分離を観察することが多い。我々はベシクルが有限の半径をもつ球面と仮定して、その表面を拡散する円形状ドメインの定常状態における衝突頻度を解析的に求めた。さらにその結果とスモルコフスキーの理論を用いて、平均のドメインサイズが漸近的に時間の1/2乗に比例して増大することを示した。

(2) 脂質二重膜におけるリーフレット拡散[4]

これまでの生体膜のモデルでは、脂質二重膜を単一の二次元流体として扱い、その中での拡散の振る舞いなどが議論されてきた。近年の実験的技術の進展により、一方の単層膜（リーフレット）のみに含まれるタンパク質やドメインのダイナミクスに関する知見が得られるようになってきている。我々は図1のように、脂質二重膜を二枚の結合した二次元流体として扱い、周囲の非対称な溶媒も取り入れた流体モデルを考察した。特に二枚のリーフレット間には、速度差に比例する摩擦力が働くとした。具体的な計算として、液体ドメインの拡散係数の摩擦係数依存性や、サイズ依存性などを詳細に調べた。

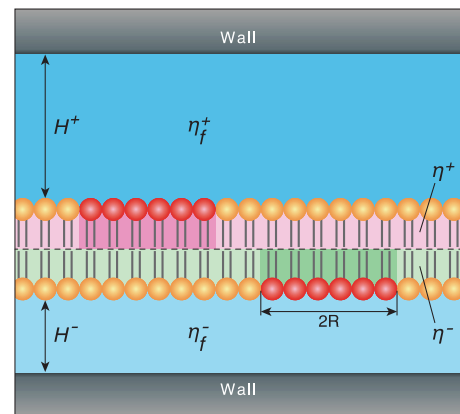


図1 基板に挟まれた脂質二重膜

(3) 二成分溶液中のストークスの抵抗法則[5]

現時点ではまだ生体膜と直接の関係はないが、我々は流体の一方の成分との親和性を考慮した二成分流体中の流体力学を定式化して、ストークスの抵抗法則がどのように変更されるかを調べた。その結果、抵抗係数の補正は相関長の6乗に比例することが示された。この結果は、抵抗係数の補正が相関長に比例すると考えられていた従来の予測と異なり、マイクロレオロジーの理論にも影響を与える可能性がある。

(4) 化学反応による油滴の形態変化

生体膜上では、脂質分子やタンパク質を介した化学反応が行われている。化学反応を伴う系の物理的理解は重要課題であるが、未解決のまま取り残されてきた課題であると言える。

A03-001 の菅原、豊田らは、化学反応による様々な界面活性剤集合体の形態変化を実験で観察している。我々はこれらの現象の理解を目指して、親水成分と油成分が反応重合して脂質膜を形成するモデル系のシミュレーションを行っている。

この結果、化学反応が油滴内部で進行し、平面膜片を経由するベシクル形成、内部でタマネギ状にラメラが積層した構造などが得られた。平板ラメラからベシクルに転移する過程で油成分がエッジに集中して現れることで、この転移が促進されていることが現在判明している。

(5) 脂質膜の複雑構造形成の大規模シミュレーション[6, 7]

非イオン性界面活性剤は剪断流の印加などにより複雑な構造を形成する。脂質膜を高度に粗視化して、短距離相互作用する粒子がモノレイヤーを形成するモデルを用いて大規模並列計算を行うことによって、その構造化とレオロジーを研究している。剪断流下、脂質膜中に発生している欠陥に誘引される、流れに平行な軸に関して対称なロール形状への不安定化を起こすことがシミュレーションにより分かった(図2)。これは、よく見られるオニオン相と呼ばれる相の前駆構造として、実験で議論されているものと同様であると考えられる。

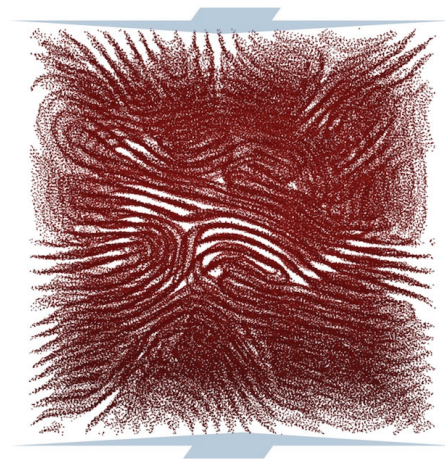


図 2. せん断流によって誘起される界面活性剤膜のロール状構造。

(6) 構造ガラスにおける密度ゆらぎの研究[8]

高密度の二次元二成分斥力粒子において、ガラスの遅い不均一ダイナミクスと局所密度、並びに静的粒子配置から基準振動解析を経由して予言される長波長振動モードの関係を考察した。微弱な密度場と動的不均一の空間的対応までは見出されたが、前者では相関長の低温に向かっての成長は見出されなかった。基準振動解析の振動モードと動的不均一性の波数依存性に一定の相関があることから、密度が僅かに低くなった領域としてみられる脆弱な領域との間の相互作用が、大規模振動を介して長波長の動的ゆらぎとなっている可能性が示唆される。

参考文献:

- [1] 好村滋行, 今井正幸, 日本物理学会誌 **68**, 714 (2013).
- [2] S. Komura and D. Andelman, to be published in *Adv. Coll. Int. Sci.* (2014).
- [3] K. Seki, S. Komura, and S. Ramachandran, *J. Phys.: Condensed Matter* **25**, 195105 (2013).
- [4] K. Seki, S. Mogre, and S. Komura, to be published in *Phys. Rev. E* (2014).
- [5] R. Okamoto, Y. Fujitani, and S. Komura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 084003 (2013).
- [6] H. Shiba, H. Noguchi, and G. Gompper, *J. Chem. Phys.* **139**, 014702 (2013).
- [7] 芝隼人, 野口博司, 分子シミュレーション研究会会誌: アンサンブル **16**, 59-65 (2014).
- [8] H. Shiba and T. Kawasaki, *J. Chem. Phys.* **139**, 184502 (2013).