

## 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

東北大学・金属材料研究所 芝隼人

京都大学・福井謙一記念研究センター 多羅間充輔

### (1) 非平衡環境下における生体膜のゆらぎ [1]

生体膜と細胞骨格の相互作用のように、生体膜の外部環境における非熱的なゆらぎによって誘起される膜の非平衡ゆらぎについて考察した。具体的には、ランダムな速度を発生するアクティブな壁と相互作用する生体膜のブラウン運動の解析を行った。ポテンシャルで束縛された膜の流体力学方程式を解くことにより膜の変位の運動方程式を導出し、膜断片の平均二乗変位を計算した。壁が静的な場合、すなわち熱ゆらぎしか存在しない場合、平均二乗変位は時間の  $2/3$  乗と  $1/3$  乗で増加する領域が見られる。一方、壁がランダムな速度を発生する場合、平均二乗変位が時間に比例する時間領域が存在することがわかった。これは膜のブラウン運動としては異常な振る舞いである。さらにアクティブな壁が特徴的な時間スケールを有する場合、平均二乗変位が時間に比例する領域がさらに拡大することもわかった。我々の結果は、赤血球膜の非平衡ゆらぎを測定した最近の実験結果とも一致している。

### (2) 脂質二重膜ベシクルの緩和ダイナミクス [2, 3]

圧縮性のある脂質二重膜の緩和ダイナミクスの詳細な解析を行い、特にベシクル内外の粘性率の非対称性の効果を調べた。自由エネルギーの解析の結果、脂質密度と膜曲率の幾何学的な結合により、長波長と中間的波長で起こる二種類の不安定性が存在することがわかった。二重膜ベシクルのダイナミクスについては、オンサーガーの変分原理に基づいた厳密な定式化を行った。我々は球面調和関数表示を用いて、三つの連動する緩和率を解析的に求め、複数のモード交差現象が生じることを確認した。特にベシクルの内側の粘性率が外側と比べて大きくなると、曲げモードとスリップモードのクロスオーバーが短波長側に大きくシフトすることがわかった。我々は得られた結果を用いて、脂質二重膜ベシクルのゆらぎのパワースペクトルを計算し、さらに非熱的なゆらぎが働く場合のスペクトルの変化を検討した。

### (3) 粘弾性体中のアクティブな力双極子による異常拡散

アクティブな力双極子を有する粘弾性体中のブラウン運動について検討した。粘弾性体は二流体モデルで記述し、タンパク質を模倣したアクティブな力双極子の相関は特徴的な緩和時間をもつとした。プローブ粒子の平均二乗変位を計算した結果、熱ゆらぎのみ存在する場合、平均二乗変位は時間の 0 乗から 1 乗の間で変化することを求めた。一方、アクティブな力双極子によって、平均二乗変位は時間の 0 乗から 2 乗の間の全ての異常拡散が起こることを導いた。我々の結果は、近年の細胞中の異常拡散の振る舞いを適切に説明しており、生きている細胞と死んだ細胞では異常拡散のメカニズムが異なることが明らかになった。

### (4) バナナ状タンパク質によるベシクル破裂 [4]

バナナ状タンパク質の吸着による生体膜の変形をメッシュレス膜模型のシミュレーションを用いて研究した。タンパク質の弾性を上げたり、膜端の線張力を下げたりすると、タンパ

ク質による膜変形が膜の破裂を起こし、図1に示すようにベシクルのトポロジー変化を起こすことを明らかにした。たんぱく質が負の自発曲率を持つ場合は膜の破裂はベシクルの裏返りを起こし、トロイド状ベシクル形成のほか、複数のベシクルの形成をさせることがある。

#### (5) 核膜形状の構築 [5]

核膜は小胞体と繋がっているが、小胞体を除くと、高いトポロジー種数を持つストマトサイトと見なすことができる。この形状は核膜孔複合体による膜孔サイズの拘束だけでは形成されず、核質の浸透圧による核質体積の増加、核膜槽の体積の減少、核膜孔間の反発力などによって安定化させることができることを明らかにした。

#### (6) 局所応力の計算のための三体力の分解法 [6]

古典分子動力学計算において二体力による局所応力を Irving-Kirkwood-Noll 法を用いて求めることができる。多体力については二体力に分解して計算されるが、その分解法はまだ十分に確立されていない。我々は新しく Force Center Decomposition、Hybrid Decomposition という分解方法を提唱し、三体力についても不定性があることを示した。いずれも運動量、角運動量保存を満たす局所応力テンソルを与えるが、得られる応力分布は分解法に大きく依存することが明らかとなった。

#### (7) ガラスの長波長音波振動 [7]

大規模分子動力学計算を用いて、2次元と3次元のガラス動力学が根本的に異なることを示した。2次元では結晶における Mermin-Wagner の定理と同じ原理により、巨大な長波長音波振動が発生し、対数的に発散する熱振動振幅によって特徴づけられる。振動の影響を受けない協調再配置の動力学を特徴付ける関数の導入により、2次元系においても、ガラス的緩和固有の動力学を抽出することができる。

参考文献:

- [1] K. Yasuda, S. Komura, and R. Okamoto, *Phys. Rev. E* **93**, 052407 (2016).
- [2] R. Okamoto, Y. Kanemori, S. Komura, and J.-B. Fournier, *Eur. Phys. J. E* **39**, 52 (2016).
- [3] T. V. Sachin Krishnan, R. Okamoto, and S. Komura, *Phys. Rev. E* **94**, 062414 (2016).
- [4] H. Noguchi, *Phys. Rev. E* **93**, 052404 (2016).
- [5] H. Noguchi, *Biophys. J.* **111**, 824-831 (2016).
- [6] K. M. Nakagawa and H. Noguchi, *Phys. Rev. E* **94**, 053304 (2016).
- [7] H. Shiba, Y. Yamada, T. Kawasaki, and K. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 245701 (2016).

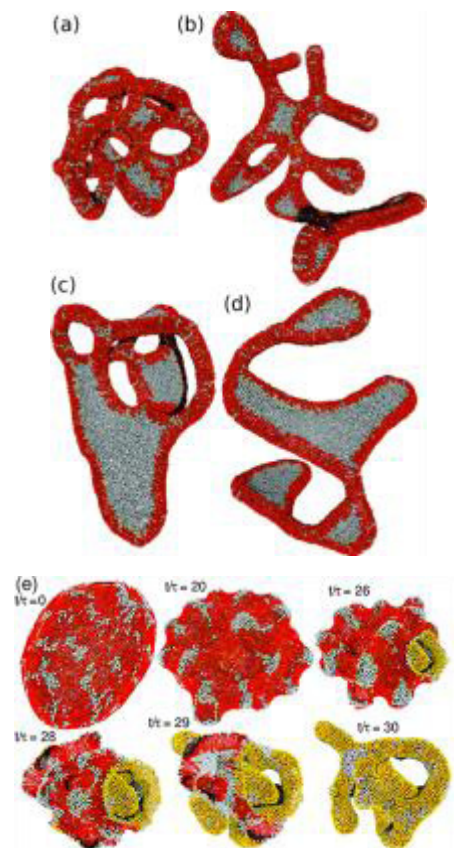


図1. バナナ状たんぱく質によるベシクルの破裂 [4]。(a)-(d) たんぱく質が正の自発曲率を持つ場合のベシクルの最終構造。(e) 負の自発曲率を持つ場合のベシクルの時間変化。