

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

(1) 積層脂質膜における相分離の連動性[1]

近年、多成分脂質二重膜が三次元的に積み重なった系における相分離の実験が行われ、ドメインが円柱状に積層することが報告された。我々は、積層した二次元イジングモデルを用いて、異なる膜の相分離の連動性を調べた。各脂質膜で脂質分子の組成は保存するため、川崎ダイナミクスを用いたモンテ・カルロシミュレーションを行い、相分離ドメインの構造について検討した。その結果、膜間に有限の相互作用が存在すると、熱平衡状態においてドメインは必ず連結することが明らかになった。また、我々はドメインの成長ダイナミクスにも着目し、膜間に働く相互作用による成長指数の変化を検討した。その結果、温度クエンチの深さが膜間相互作用の増加とともに深くなることで、膜の相分離が加速されることがわかった。またクエンチの深さを一定にすると、系は二次元から三次元へのクロスオーバー現象を示し、成長指数はむしろ減少することを示した。

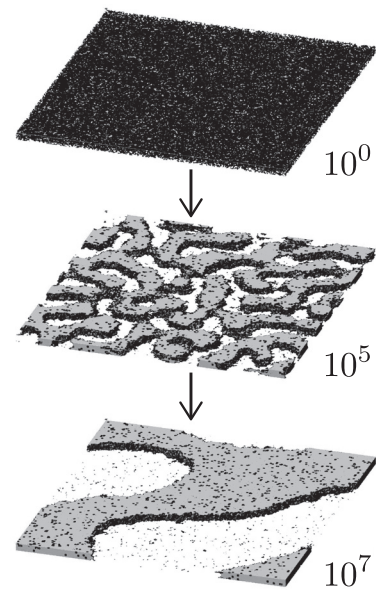


図1 積層脂質膜における相分離ダイナミクス

(2) 生体膜のブラウン運動[2]

我々はアクティブなタンパク質を含む生体膜を考えて、特に生体膜の周囲の媒質が粘弾性体である場合に、膜断片のゆらぎ（平均二乗変位）の解析を行った。我々のモデルにおいて、タンパク質は膜内を側方拡散して、さらに局所的に膜の曲率を誘起すると仮定した。その結果、拡張された Einstein の関係式として、膜断片の平均二乗変位を導出した。周囲の粘弾性体の弾性率が周波数に対して冪的に依存する場合、膜断片はその冪指数を反映した異常拡散を示すことがわかった。この異常拡散は熱ゆらぎの効果として生じるが、我々はさらにタンパク質が媒質に対してアクティブな非平衡力を及ぼす場合についても同様の計算を行った。その結果、拡張された Einstein の関係式は修正を受けて、タンパク質の力双極子エネルギーに依存する実効的溫度を用いて表されることがわかった。この関係式を用いると、生体膜のゆらぎから細胞質のレオロジー的性質を知ることができるため、我々はこれを「生体膜マイクロレオロジー」と呼んでいる。現在は生体膜と細胞骨格の相互作用を念頭に置いて、アクティブな壁と相互作用する生体膜のブラウン運動について解析を進めている。具体的には壁でアクティブな速度が誘起される場合、生体膜の平均二乗変位は通常拡散のように時間に比例することを示した。

(3) BAR タンパク質による膜チューブ形成[3, 4]

最近、生体膜に吸着し膜を曲げるバナナ状の BAR ドメインを持つタンパク質が多く見つ

ている。このバナナ状タンパク質による膜変形機構を明らかにするため、我々はメッシュレス膜模型を用いたシミュレーションを行った。タンパク分子同士に直接の引力を与えなくても、タンパク質の自発曲率を上げていくと膜を介した相互作用で自己集合する。しかし、通常の相分離と異なり、この集合はタンパク質の軸に沿った方向と垂直方向に分かれて段階的に起こることを明らかにした。ベシクルでは自発曲率を上げていくと赤道への集合がまず起こり、その後、一箇所に集合する。高タンパク密度では多面体状ベシクルが形成する。また、これまでの研究ではタンパク質に沿った自発曲率のみが考慮されていたが、側方に弱い自発曲率を加えることでチューブ形成のダイナミクスが大きく変わることが分かった。平衡状態の性質はそれほど変化しないが、集合途中にみられるネットワーク構造の安定性が変わることによって、チューブ形成速度が大きく変わる。側方に負の自発曲率を持つ場合、図2に示すように膜全体に広がったネットワークを形成し、ネットワークからチューブが伸びる。それに対して、側方に正の自発曲率を持つ場合は、ネットワークは形成せずに、多くの短いチューブが形成される。

#### (4) 高いトポロジー種数を持つベシクルの形態転移[5]

トポロジー種数 (genus)  $g$  の大きな脂質ベシクルの形状はこれまでにほとんど調べられていない。我々は動的三角格子膜模型計算により、 $g \geq 3$  では穴の配置の変化によって形態変化が連続的な変化から不連続な転移に変わることを明らかにした。

#### (5) ゆらぎ脂質膜における3つの表面張力の関係[6]

液晶相における脂質膜では膜がゆらぐために3つの表面張力を定義できる。実際の膜面積の共役量として定義される内部張力、平面に射影された面積に対する力学張力、膜高のスペクトラムから計算されるゆらぎ張力である。このうち外からストレスをかけて直接コントロールできる張力は力学張力である。我々はこれらの張力の関係を明らかにするため格子モンテカルロ計算を行った。内部張力と力学張力の間にはゆらぎに起因する張力差があり、ゆらぎ張力は力学張力に本計算の精度で一致する。前者はFournierらによるガウシアン近似による理論計算値とよい一致を示すが、後者は異なり、ガウシアン近似で無視した非線形項が重要であることが明らかとなった。

また、A04 公募班山本グループと A01-003 佐野グループと共同でコロイド懸濁液の流体力学計算法 Smoothed Profile Method の非定常せん断流におけるスキームの改良を行った[7]。

#### 参考文献:

- [1] T. Hoshino, S. Komura, and D. Andelman, *J. Chem. Phys.* **143**, 243124 (9pp) (2015).
- [2] S. Komura, K. Yasuda, and R. Okamoto, *J. Phys.: Cond. Mat.* **27**, 432001 (7pp) (2015).
- [3] H. Noguchi, *J. Chem. Phys.* **143**, 243109 (2015).
- [4] H. Noguchi, *Sci. Rep.* **6**, 20935 (2016).
- [5] H. Noguchi, *EPL* **112**, 58004 (2015).
- [6] H. Shiba, H. Noguchi, and J.-B. Fournier, *Soft Matter* **12**, (2016) in press.
- [7] J. J. Molina, K. Otomura, H. Shiba, H. Kobayashi, M. Sano, and R. Yamamoto, *J. Fluid Mech.* in press.

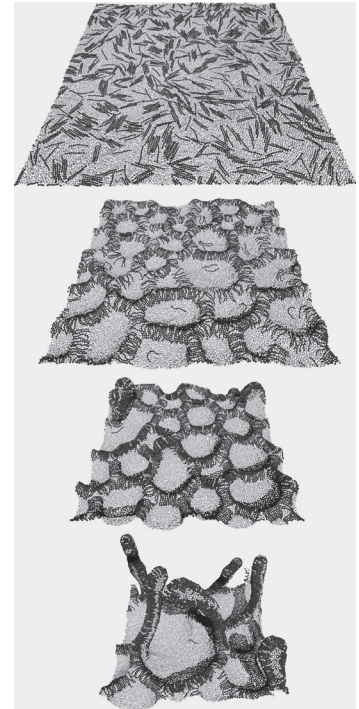


図2. バナナ状タンパク質による膜チューブ形成。側方に逆向きの曲率を持つときはネットワーク状の構造を経る[4]。