

平成 21 年 6 月 23 日現在

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2006～2008

課題番号：18560185

研究課題名（和文）非均質な膜モデルにおける相転移とその応用法に関する研究

研究課題名（英文）Phase transitions in inhomogeneous surface models for membranes and studies on the application

研究代表者

鯉淵 弘資（KOIBUCHI HIROSHI）

茨城工業高等専門学校・機械システム工学科・教授

研究者番号：00178196

研究成果の概要：膜を構成する脂質分子の流動性を模擬した fluid 膜モデルと流動性を持たない crystalline 膜モデルを 3 角形分割された球面上で定義し、膜骨格や穴の存在といった非均質成分がその形態変化の相転移に与える影響および形態変化に果たす役割等について研究した。その結果「これらの非均質成分は従来の均質な膜モデルに起こる形態変化の相転移に大きな影響を与える」ことが明らかになった。例えば、膜骨格と脂質分子の流動性は膜の形態変化の多様性に関わること、さらに、膜がつぶれる collapsing 相転移と膜揺らぎ相転移は一般には 2 つの別のものであること、などが分かった。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
18 年度	1,300,000	0	1,300,000
19 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
20 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	660,000	4,160,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：流体力学

キーワード：脂質分子膜，人工膜小胞，生体細胞膜，膜骨格，形態変化，相転移，統計力学

1. 研究開始当初の背景

レシチンなどの脂質分子が自己組織化して作る脂質分子膜（生体細胞膜や人工膜小胞）には、「膨らんだ状態」と「つぶれた状態」の間に相転移が起こると予想される。ある人工膜小胞でこの相転移が実際に起こるとい報告もあり、この相転移の研究も少しずつ進んでいる。

しかし、膜を構成する脂質分子の「運動が制限」されている場合、この相転移がそのことによどのような影響を受けるのかはまだよくわかっていない。例えば、生体細胞膜の場

合は膜骨格と呼ばれる裏打ち構造によって、脂質分子の拡散運動が局在化されていることは知られている。膜に穴が開いていることもよく知られているが、このような穴の存在からも脂質分子の運動は影響を受けよう。人工膜小胞においても水溶液中で膜の一部をレーザーピンセットなどの装置を使って固定することがある。

2. 研究の目的

本研究の目的は、膜骨格、穴などの膜の非均質成分や膜の固定条件等々の「境界条件」

が相転移に与える影響を明らかにすることである。ここで、非均質というの、例えば膜骨格があると、膜面の強度は膜骨格部分とそれ以外の部分では異なっているため、膜の強さは膜面全体で一様(=均質)ではなく「非均質」になるという意味である。

3. 研究の方法

本研究では、以下に述べる膜骨格や穴という非均質成分を持つモデルを中心にモンテカルロ(MC)シミュレーションを実行し、その形態変化に関する相構造を調べる。

膜モデルは、3角形分割された球面上でハミルトニアンを定義することで構成される。そのハミルトニアンは、従来の標準的な Helfrich(または Helfrich-Polyakov)のハミルトニアンを主に用いる。

脂質分子の運動としては、膜面に垂直な方向を含むあらゆる方向へのブラウン運動と膜面内での自由拡散運動(=流動性)の2つがある。従って、膜モデルは、脂質分子の流動性の有無で、「流動性を持たない膜(=fixed-connectivity surface または crystalline surface)」と「流動性を持つ膜(=fluid surface)」に分けられる。脂質分子の流動性は、動的3角形分割というMC法で実現される。分子と分子を結ぶボンドをつなぎ換える(=フリップさせる)ことで分子同士の連結が解除され、分子の拡散が模擬できるのである。

本研究では非均質性として、膜骨格(skeleton)と穴(hole)を仮定する。これらの非均質成分を持たない fluid surface モデルでは、脂質分子は膜上を一様に拡散できる。しかし、これらの非均質性を持つモデルにおいては、脂質分子の運動は膜骨格などにより「境界条件」としての制限を受ける。Crystalline surface モデルにおいても、脂質分子のブラウン運動が穴や膜骨格の等の存在に影響されるのは容易に想像できる。

4. 研究成果

~ に分けて述べる:

. 3角形分割された球面上で多数の穴を持つモデルについて、その形態変化に関する相構造を調べた結果を要約すると、次のようになる。

(1) 膜小胞のサイズに比べて無視できない程度の大きさの穴が多数あいていると、膜がつぶれる相転移は起こるが、膜表面の揺らぎ相転移は起こらなくなることが分かった。この2つの相転移は、均質な膜モデルでは同時に起こるため、一方の相転移に伴ってもう一方の相転移が起こるといった一つの相転移の2つの側面と考えられているが、必ずしもそ

うではないことを、この結果は示している。(論文13)

(2) 穴の大きさが膜小胞のサイズに比べて無視できるほどの小さな穴が多数開いている場合については、膜がつぶれる1次相転移と膜揺らぎの2次相転移が同時に起こることが分かった。均質な膜モデルでは両者ともに1次相転移なので、この結果は、小さな穴が多数開いてると膜揺らぎの相転移の強さは弱くなることを示している。(論文4)

. 膜を支える裏打ち構造としての膜骨格を通常の3角形分割されたメッシュの上に、そのメッシュの部分メッシュとしてモデル化する。部分メッシュはもとのメッシュ上にコンパートメント構造を作り、そのコンパートメント境界が膜骨格に対応する。膜骨格を持ついくつかモデルについてその相構造を調べた結果を要約すると次のようになる。

(3) 膜骨格が柔らかくて膜骨格の働きとしては脂質分子の流動性をこのコンパートメント内に制限するだけの場合、流動性が局在化する fluid surface モデルが得られるが、このモデルでは、膜がつぶれる相転移と膜揺らぎの相転移が起こる。その相転移は1次相転移であるが、膜骨格のサイズが大きくなるにつれだんだん弱くなり、ある臨界の大きさで2次相転移になると予想できた。

このモデルは膜骨格のサイズが0の極限では流動性を持たない crystalline surface モデルになるから、流動性が局在化するモデルの相転移はこの極限で既に知られている crystalline surface モデルの相転移に一致する。

一方、膜骨格のサイズがある大きさで相転移が消失することと、膜骨格のサイズが膜全体まで大きくなった極限のモデルが一様な流動性を持つ均質な fluid surface モデルであることから、流動性が局在化するこのモデルで起こる相転移は、一様な流動性を持つ均質な fluid surface モデルには起こらないことが予想される。この意味において、この研究は、間接的にはあるが「均質な fluid surface モデルにおける形態変化の相転移」の研究でもある。(論文11)

(4) 膜骨格が膜を支える役割を持つようなモデルは、その膜骨格の交差する場所(=junction)の剛性によっていくつかのモデルが定義される。ここでは簡単のため、流動性は無視し crystalline surface とした。

Junction を硬い小さな面(=剛体)とした場合、膜骨格の硬さをパラメータとして変化させると、膜形状に関して球面相と膜がつぶれた collapsed 相、の2つの相が存在し、そ

れらは1次相転移で隔てられている。Junctionを小さな2次元の弾性体とした場合にも剛体の場合と同様な相転移が見られる。(論文14)

(5) 膜骨格が膜を支える役割を持つようなモデルで、流動性は(3)のモデルと同じく膜骨格のコンパートメント内に制限されているような fluid surface モデルの相構造を調べた。

Junctionを硬い小さな面(=剛体)とした場合、膜骨格の硬さをパラメータとして変化させると、膜形状に関して4つの相が観測された。球面相、円板相、棒状相、膜がつぶれた collapsed 相、の4つであり、どれも1次相転移で隔てられている。球面相と collapsed 相は膜形状に特別な方向がない等方相であるが、平板相と棒状相は等方性が破れた相である。相転移に伴い回転対称性が自発的に破れる現象である。(論文12)

Junction 部にも膜骨格の直線部と同様な硬さを持たせた場合には、膜形状に関して、球面相、楕円体相、平板相、棒状相、collapsed 相の5つの相が観測された。膜骨格の存在と脂質分子の流動性が多様な形態変化の源と考えられる。(論文6)

(6) 膜骨格のみからなるモデルの相構造を調べた。このモデルは(5)のモデルから膜面を取り除いたものである。膜骨格の硬さがある値より大きいと膨らんで滑らかな形になり、それ以下の硬さではつぶれるという、曲面による膜モデルと同様な相転移が、膜骨格のみのモデルに確認された。局所的には1次元の膜骨格が曲面と同様な相転移を起こすという点で興味深い結果といえる。(論文9)

(7) 膜骨格のコンパートメントのサイズをどんどん小さくしていくと、その極限で膜骨格は元の3角形格子と同じになる。この極限で得られるモデルの特徴は1次元曲げエネルギーが膜を支えることである。このモデルは膜がつぶれる1次相転移を持つが、膜揺らぎの相転移は2次の相転移となる。2次元曲げエネルギーで定義される通常の膜モデルではどちらも1次の相転移であるから、曲げエネルギーの「次元」の違いで相転移次数が変化する点で興味深い結果といえる。(論文10)

(8) 上記(7)のモデルにおいてその定義に用いた Gaussian ボンドポテンシャルを3角形に面積で置き換えたモデル(=Nambu-Goto モデルと呼ばれる)の相構造を調べた。その結果、球面相、円盤相、棒状相、collapsed 相の4つの相が確認できた。流動性を持たない場合でも多様な形態変化が見られるという

点で興味深い結果といえる。なお、円盤相、棒状相では回転対称性が自発的に破れている。(論文7)

膜骨格のコンパートメントのサイズを少しずつ大きくしていくと、あるサイズのところまでの範囲で、球面相、棒状相、collapsed 相の3つの相が確認できた。この場合は円盤相は現れないが、前述のモデルと同様に、流動性を持たない場合でも多様な形態変化が見られるという点で興味深い結果といえる。(論文2)

膜の一部を固定するという境界条件で、いくつかの膜モデルの相構造を調べた結果を要約すると次のようになる。

(9) 流動性をもつ膜の2点を固定するという条件で、相構造を調べた。その2点間の距離を、膜が細長く伸びるように、ある値にまで引っ張ると、膜がその両端の点を引く力として弦張力を求めることができる。この弦張力が、smooth 相と乱雑相において、それぞれに特徴的な2つの異なった振る舞い(=あるスケール則)を持つことを示した。その意味は有限の比較的小さな分子数で求めた結果が十分大きな分子数においても同様に成り立つということである。(論文15)

(10) 流動性を持たない膜をその断面が一定の面積になるように、2つの円形の境界で固定して相構造を調べた。この場合は、表面張力が計算できて、その結果、2つの相(=平滑相と乱雑相)の境界(=相転移点)で表面張力が不連続的に変化する可能性を示した。(論文3)

膜モデルの相構造に関し次のような結果を得た。

(11) 脂質分子の3次元構造に由来する自由度を磁性体のモデル(=XYモデル)によって導入し、この内部自由度が膜の相構造に与える影響を調べた。この膜モデルはXYモデルの自由度が曲面の自由度と相互作用するように自然に構成されている。その結果、脂質分子の交換相互作用が強いときは表面揺らぎの相転移が消失するという可能性を示した。(論文5)

モデルの膜弾性としては通常は面外変形弾性のみ仮定するが、面内変形弾性が存在する場合に相構造がどのようなかを調べた。実際、ある生体細胞膜では、面内変形に対する抵抗力が、面外変形、即ち、曲げ変形の抵抗力に比べて無視できない大きさであることが知られている。この結果、面内弾性が存在すると表面揺らぎの相転移が強くなることが分かった。(論文1)

前述の Nambu-Goto モデルと呼ばれるモデルで流動性を取り入れると、膜が細長くなって、直線的な相、細長い膜が枝分かれしているような相 (= branched polymer phase) など多様な形態が現れることを示した。脂質分子の流動性が形態変化の多様性の要因であることを示している。(論文 8)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 15 件)

1. I.Endo and H.Koibuchi, Non-trivial effect of the in-plane shear elasticity on the phase transitions of fixed-connectivity meshwork models, European Physical Journal B Vol.66, pp.467-475, (2008).
2. H.Koibuchi, Shape transformation transitions in a model of fixed-connectivity surfaces supported by skeletons, European Physical Journal B, Vol.66, pp.85-90 (2008).
3. H.Koibuchi, Surface tension in an intrinsic curvature model with fixed one-dimensional boundaries, Journal of Statistical Mechanics, P08008 (2008).
4. H.Koibuchi, Phase structure of a surface model with many fine holes, European Physical Journal E, Vol.26 pp.301-308 (2008).
5. H.Koibuchi, Possible effects of tilt order on phase transitions of a fixed connectivity surface model, Physical Review E, Vol.77, 021104(1-8) (2008).
6. H.Koibuchi, Shape transformations of a compartmentalized fluid surface, Physical Review E, Vol.76, 061105(1-5) (2007).
7. H.Koibuchi, Shape transformation transitions of a tethered surface model, European Physical Journal B, Vol.59, No. 3 pp.405-411 (2007).
8. H.Koibuchi, Phase transitions in a fluid surface model with a deficit angle term, European Physical Journal B Vol.59, No.1, pp.55-62 (2007).
9. H.Koibuchi, Phase transition of

meshwork models for spherical membranes, Journal of Statistical Physics Vol.129 No.4, pp.605-621 (2007).

10. H.Koibuchi, Phase structure of a spherical surface model on fixed connectivity meshes, Physics Letters A Vol.371, pp.278-284 (2007).

11. H.Koibuchi, Phase transition of compartmentalized surface models, European Physical Journal B Vol.57 pp.321-330 (2007).

12. H.Koibuchi, Phase structure of a surface model on dynamically triangulated spheres with elastic skeletons, Physical Review E Vol.75 051115(1-9) (2007).

13. H.Koibuchi, Collapsing transition of spherical tethered surfaces with many holes, Physical Review E Vol.75 011129(1-6) (2007).

14. H.Koibuchi, Phase transition of triangulated spherical surfaces with elastic skeletons, Journal of Statistical Physics, Vol.127 Number 3 pp.457-470 (2007).

15. S. Obata, M. Egashira, T. Endo, and H.Koibuchi, Phase transitions of an intrinsic curvature model on dynamically triangulated spherical surfaces with point boundaries, Journal of Statistical Mechanics, P11016 (2006).

[学会発表](計 12 件)

国際会議(4 件)

1. H. Koibuchi, A Compartmentalized Surface model for Membranes, International Workshop, MTE2008 (Mathematics, Technology and Education) Proceedings, T. Matsuhisa and H. Koibuchi (eds.), Ibaraki National College of Technology (Feb. 2008) pp.49-53, (2008).
2. H. Koibuchi, Phase Transitions of a Fluid Surface model with Elastic Skeletons, V Moscow International Conference on Operations Research (ORM2007), Proceedings, Moscow State University, (April 10-14, 2007), p.109 (2007).
3. T. Endo, M. Egashira, S. Obata, H. Koibuchi, Phase Transition of Extrinsic

Curvature Surface Model on a Disk, International Workshop, MTE2006 (Mathematics, Technology and Education) Proceedings, Takashi Matsuhisa (ed.), Ibaraki National College of Technology (Dec. 2006), pp.11-20 (2006).

4. H.Koibuchi, Phase Transition of a Skeleton Model for Surfaces, ICIC2006 Proceedings Part 3, Springer Lecture Notes in Bioinformatics LNBI 4115, pp.223-229 (2006).

国内学会発表(8件)

1. 鯉淵, 「膜モデルの Flat Histogram Monte Carlo シミュレーション」, 日本機械学会関東支部総会演会講演論文集, pp.59-60, (2009).

2. 飛田, 鯉淵, 「束縛された力学変数による膜モデルの相転移」, 日本機械学会関東支部総会講演会講演論文集, pp.57-58, (2009).

3. 石田, 鯉淵, 「2重膜構造をもつ面積エネルギー膜モデルの相転移」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.91-92, (2008).

4. 関口, 和田, 鯉淵, 「メッシュワークモデルの相転移」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.77-78, (2007).

5. 和田, 関口, 鯉淵, 「面内変形エネルギーを考慮した膜モデルの相転移」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.75-76, (2007).

6. 小幡, 江頭, 遠藤, 鯉淵, 「流動性のある膜における弦張力のシミュレーション」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.95-96, (2006).

7. 遠藤, 江頭, 小幡, 鯉淵, 「膜骨格で支えられた球面状膜の相転移」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.93-94, (2006).

8. 江頭, 遠藤, 小幡, 鯉淵, 「区画された液膜モデルの相転移」, 日本機械学会茨城講演会講演論文集, pp.91-92, (2006).

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

鯉淵 弘資 (KOIBUCHI HIROSHI)

茨城工業高等専門学校・

機械システム工学科・教授

研究者番号: 00178196

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

該当なし