

ベシクルの分裂に関する分子動力学シミュレーション

(山口大院理工) 浦上直人
(東北大院理工) 今井正幸

【はじめに】

生命現象において、細胞分裂は最も基本的なプロセスのひとつである。近年、人工生命の研究において、ベシクル外部から脂質分子前駆体を供給することで、ベシクルが分裂する様子を観察している(1)。また、シリンダー型と逆コーン型の2種類の脂質だけで構成したベシクルにおいても、温度をコントロールすることにより、ベシクルの分裂が観察される(2)。これらの実験結果は、タンパク質などにより細胞分裂がコントロールされているのではなく、単純な物理的プロセスにより細胞が分裂することを示唆している。そこで本研究では、分子動力学シミュレーションを行うことにより、ベシクルが分裂するために必要な条件を明らかにすることを目的とする。

【シミュレーション方法】

脂質分子を親水性2粒子、疎水性4粒子をもつ直鎖上分子とし、親水性粒子と疎水性粒子の大きさを変えることで、シリンダー型と逆コーン型の2種類の脂質分子をモデル化した。水分子は親水性1粒子でモデル化した。シリンダー型の脂質分子は5,200、逆コーン型の脂質分子は1,300、合計6,500の脂質分子でベシクルを構成し、水分子数211,000を配置した系で、温度・圧力一定のシミュレーションを行った。シミュレーションポテンシャルはMarkvoortら(3)のものを参考にした。

【結果と考察】

Fig. 1 にシミュレーションで得られたベシクル分裂の様子を示す。Fig. 1(a) は初期状態であり、ピーナッツ型のベシクルを用いた。ベシクル内の水分子数は13,376、2分子膜の外側と内側の脂質分子数差は $\Delta N = 2,382$ である。2分子膜の内側に逆コーン型の脂質分子を多く配置している。時間経過とともにピーナッツ型のベシクルのネック部分が細くなり、ベシクル内の水分子が2つに分かれる。そして、ベシクルの形状はlimiting shapeに変化した(Fig. 1 (b))。最終的に、ネック部分が切れ、ベシクルが分裂する様子を再現することができた(Fig. 1 (c))。2分子膜内外の脂質分子数差 ΔN の異なるベシクルを初期状態としてシミュレーションを行ったところ、分裂が観察できる ΔN の領域が存在することが分かった。

【参考文献】

- (1) K. Kurihara *et al.*, *Nat. Chem.*, 3 (2011) 775-781.
- (2) Y. Sakuma and M. Imai, *Phys. Rev. Lett.*, 107 (2011) 198101.
神保岳大ら、第4回ソフトマター研究会予稿 (2014).
- (3) A. J. Markvoort *et al.*, *Biophys. J.*, 99 (2010) 1520.

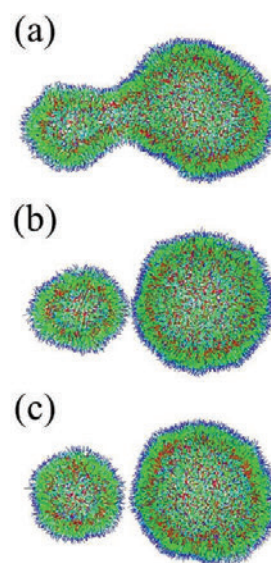


Fig. 1 Simulation snapshots of the process of vesicle division. (a) Initial state, (b) limiting shape, (c) vesicle division.