

# 膜を貫通する高分子の相転移とダイナミクス

九州工業大学 情報工学部 松山 明彦<sup>1</sup>

## 1 はじめに

様々な生命現象は、DNA やたんぱく質などの高分子と生体膜（脂質 2 分子膜）間の相互作用によって発現している。生体膜中での高分子鎖がもつ様々な相転移現象と生体膜の物性を研究することは、基礎的かつ重要な問題である。

生体膜や細胞に細孔（穴）が埋め込まれているとき、膜の両側の浸透圧の差によって DNA やたんぱく質などの高分子が膜によって分離されたり、あるいは透過してくることが知られている。細孔のなかの高分子のセグメントは形態エントロピーを損失しているが、細孔の外にある高分子のセグメントは細孔内にいるときと比べて多くの自由度をもつ。したがってエントロピー効果によって高分子は細孔内から、外へ抜け出てくる [1, 2, 3]。どの程度分離されるかは、このエントロピー効果と浸透圧の差によって決まる。本研究では高分子鎖がもつ様々な相転移現象と膜を貫通する問題を連結させ、平衡状態における分離の程度や膜を貫通する高分子のダイナミクスについて研究する。

## 2 膜貫通高分子の相転移

膜にあいた穴（チャンネル）を通して高分子が領域 1 から他の側（領域 2）へ貫通する場合、あるいはその逆、を考えよう（図 1）。穴の直径は高分子の直径と同程度位であるとする。膜は穴の空いた個体の壁として扱い、壁と高分子鎖の相互作用は十分弱いとする。熱平衡状態において高分子セグメントが領域 1 と 2 へどのように分配されるかを、ここでは、高分子鎖のコイル・グロビュール転移の理論を基礎に考える [4]。セグメント数  $n$  の一本の高分子鎖の自由エネルギー ( $F$ ) は、各領域における高分子鎖の弾性自由エネルギーと混合自由エネルギーの和で与えられる。

$$F(n_1, \alpha_1, \alpha_2) = F_1(n_1, \alpha_1) + F_2(n_2, \alpha_2) + F_0(n - n_1 - n_2)$$

ここで、 $n_i$ 、 $\alpha_i$  はそれぞれ、各領域における高分子セグメントの数と、高分子半径の膨張因子を示す。領域 1 と 2 のそれぞれの溶媒と高分子鎖の間の相互作用は Flory-Huggins パラメーター  $\chi_i$  ( $i=1, 2$ ) で与えられる。熱平衡状態は自由エネルギーを 3 つの変数  $n_1, \alpha_1, \alpha_2$  で最小にすることによって得られる。図 2 は領域 2 が  $\chi_2 = 0.5$ （テーター溶媒）のとき、領域 1 を良溶媒から貧溶媒にしていっていったときの、領域 1 における高分子セグメントの割合 ( $n_1/n$ ) を計算した結果を示す。高分子のセグメント数が 10 から 100 まで

<sup>1</sup>E-mail: matuyama@bio.kyutech.ac.jp ; <http://iona.bio.kyutech.ac.jp/~aki/>

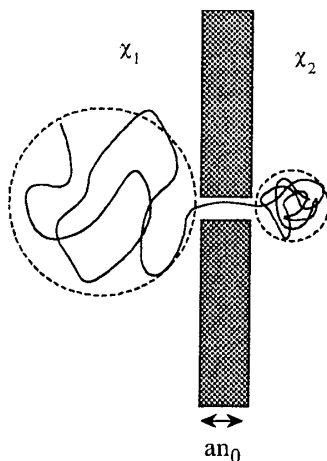


図 1: 膜を貫通する高分子

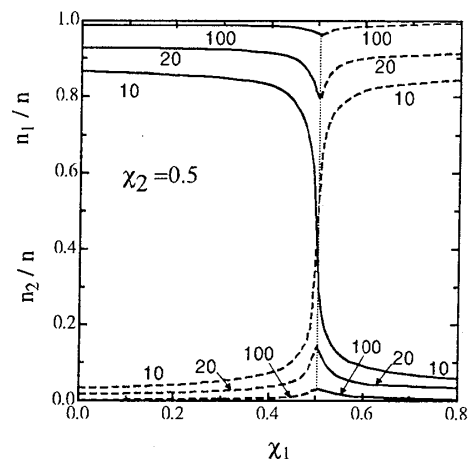


図 2 膜貫通高分子の一次相転移

変えてある。分子量の大きい高分子では、 $\chi_2 = \chi_1$  のところで、領域 1 にある高分子セグメント数の値が領域 2 の方へ不連続に減少していることがわかる。膜の両側での溶媒条件を変えることで、膜貫通高分子鎖の一次相転移 [4] が起こる。

### 3 膜貫通高分子鎖の時間発展

図 2 から解るように、 $\chi_1 < \chi_2$  の時、熱平衡状態では高分子セグメントは殆どが、領域 1 にある。領域 2 から 1 への高分子セグメントの移動の時間発展は、セグメント数  $n_1$  に対する Langevin 方程式

$$\zeta_1 \frac{\partial n_1}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial n_1} + g_1(t), \quad (1)$$

を数値的に解くことで解析することが出来る。ここで、摩擦係数は  $\zeta_1 = 6\pi\eta_1 a n_1^2$  である。貫通過程の後期段階での時間発展は、式 1 を解析することで

$$n_1 \propto t^{1/(1+\nu)}$$

が得られる。従って、良溶媒の領域へ高分子鎖が貫通していくとき ( $\nu = 3/5$ , Zimm モデル)、領域 1 のセグメント数の時間変化は (後期段階で)  $n_1 \propto t^{5/8}$  で与えられる。

### 参考文献

- [1] W. Sung and P. J. Park, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), 783.
- [2] M. Muthukumar, J. Chem. Phys. **111** (1999), 10371.
- [3] E. D. Di Marzio and J. J. Kasianowicz, J. Chem. Phys. **119** (2003), 6378.
- [4] A. Matsuyama, J. Chem. Phys. **121** (2004), 604.