

## 脂質2分子膜におけるリップル相形成の理論

名大工 本田勝也, 木村初男

多彩なパターンを示す両親媒性の脂質分子と水からなる体系に興味をもたれている。特に、生体膜のモデルとしてラメラ層は関心を集め、その相転移現象に対して多くの実験的、理論的研究が行われてきた。しかし、平板状のラメラ構造を示す $L_\alpha$ 相と $L_\beta$ 相の中間温度領域に現れる $P_\beta$ 相のリップル構造については、多くの実験や理論があるにもかかわらず、その機構についても結論がでていない。この報告では、新しい現象論を提出して一つの結論を導出する。詳しくは、J. Phys. Soc. Jpn. 60, (1991)1212. を参照のこと。

まず問題を設定しよう。水の量が40g% をこえると転移温度が水量に依存しないという実験事実より、2分子膜間の相互作用は無視できるとおもわれる。したがって、一組の2分子膜だけを取り出して考察することができる。膜の構造変化はx軸に沿って起こると仮定する。図1のように、2種類の場の量を上(i=1)と下(i=2)の層それぞれに導入する。ここで、 $u_i(x)$ は極性頭部の変位を、 $\sigma_i(x)$ は炭化水素鎖の配位を表す秩序変数である。

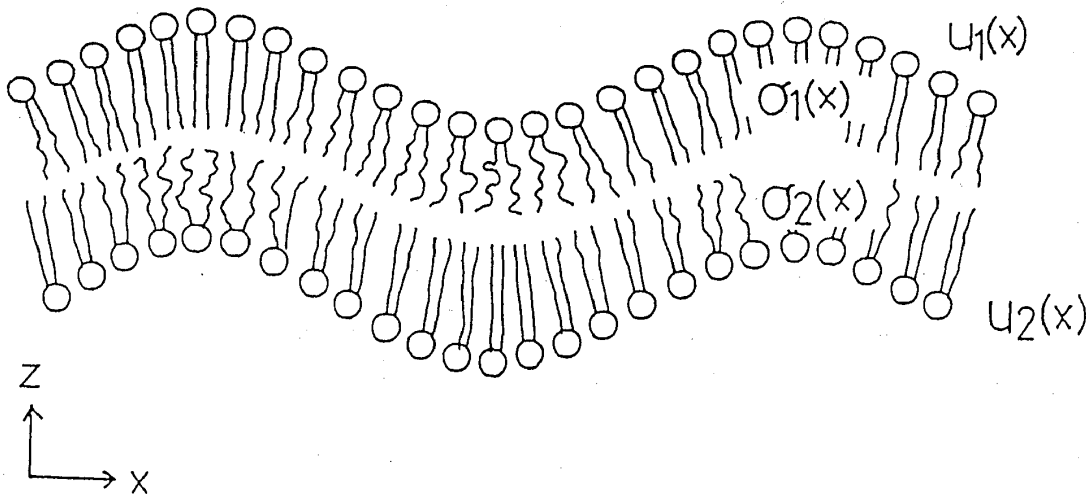


図1

主転移の本質は、炭化水素鎖に生じる集団的な形態変化であると考えられており、次のギブス自由エネルギーで議論される。

$$g(\sigma(x)) = -\frac{a}{2}\sigma(x)^2 + \frac{b}{4}\sigma(x)^4 - \eta(T)\sigma(x), \quad (1)$$

ここで、係数  $a$  と  $b$  は正の定数、 $\eta(T)$  は温度  $T$  の減少関数で、 $T=T_0$  で符号を変えるものとする。(1) 式を最小にする  $\sigma$  は温度とともに減少し、 $T_0$  で1次の相転移（主転移）を起こす。

脂質2分子膜に対するモデル自由エネルギーを次のように与える。

$$G = G_{local} + G_{nonlocal}, \quad (2)$$

$$G_{local} = \int dx [g(\sigma_1(x)) + g(\sigma_2(x)) + \frac{B}{2} \{u_1(x) - u_2(x) - D\}^2], \quad (3)$$

$$G_{nonlocal} = \frac{1}{2} \int dx [C \{ (\frac{d^2 u_1(x)}{dx^2})^2 + (\frac{d^2 u_2(x)}{dx^2})^2 \} + U \{ (\frac{d^2 \sigma_1(x)}{dx^2})^2 + (\frac{d^2 \sigma_2(x)}{dx^2})^2 \} + K \{ \sigma_1(x) - \sigma_2(x) \} \{ \frac{d^2 u_1(x)}{dx^2} + \frac{d^2 u_2(x)}{dx^2} \}]. \quad (4)$$

局所的部分は3項からなるが、1, 2項は炭化水素鎖の秩序による効果を、第3項は膜厚に関する弾性エネルギーを表している。非局所的部分是对称性の考察より必要最小限の項目から構成されている。第3項が上下層の相互作用を表し、上下層における炭化鎖の秩序度の差による鎖の排除体積効果の違いによって膜に負の曲げエネルギーを起因させる。勿論その他の項も存在しうが、結果には定量的な差しか生じない。

自由エネルギーの最小条件から、 $u_{\pm}(x) = u_1(x) \pm u_2(x)$ ,  $\sigma_{\pm}(x) = \sigma_1(x) \pm \sigma_2(x)$  を導入して

$$\frac{d^2 u_{+}(x)}{dx^2} = -\frac{K}{C} \sigma_{-}(x), \quad (5)$$

$$u_{-}(x) = D, \quad (6)$$

$$0 = -a\sigma_{+}(x) + \frac{b}{4} \{ \sigma_{+}(x)^3 + 3\sigma_{+}(x)\sigma_{-}(x)^2 \} - 2\eta(T) + U \frac{d^4 \sigma_{+}(x)}{dx^4}, \quad (7)$$

$$0 = -(a + \frac{K^2}{C})\sigma_{-}(x) + \frac{b}{4} \{ \sigma_{-}(x)^2 + 3\sigma_{+}(x)^2 \} \sigma_{-}(x) + U \frac{d^4 \sigma_{-}(x)}{dx^4} \quad (8)$$

が得られる。(5) 式より、炭化鎖の秩序度が上下層で異なっている場合に、膜の変動が発生しうることが理解される。また、膜厚が一定 ( $\bar{\sigma}$  を通じて温度依存) であることが(6) 式から分

かる。(7) と (8) 式は常に  $\sigma_+(x)=2\bar{\sigma}$ ,  $\sigma_-(x)=0$  の解を有するが, これは  $u_+(x)=一定$  である  $L_\alpha$  相および  $L_\beta$  相に対応している。 $-a+3b\bar{\sigma}^2=d^2g(\bar{\sigma})/d\bar{\sigma}^2>0$  に注意し, この解の安定性を調べると, 周期構造 (リップル相) が現れる条件は,

$$\frac{d^2g(\bar{\sigma})}{d\bar{\sigma}^2} \leq \frac{K^2}{C} \quad (9)$$

と得られる。主転移は 1 次転移であるから,  $T=T_0$  でも (9) 式の左辺は有限に留まる。したがって, 体系のパラメータ  $K^2/C$  の値によっては,  $P_\beta$  相が出現しないことがある。図 2 はその概略図である。

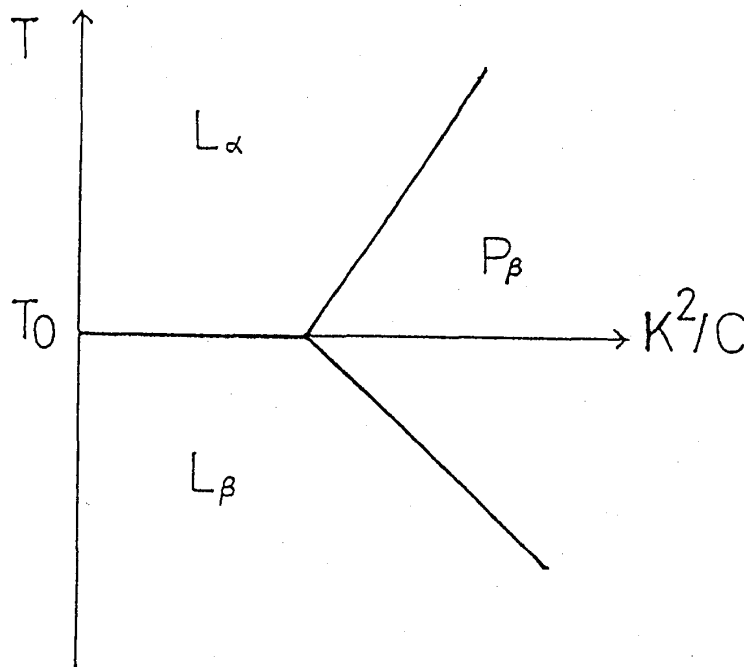


図 2

以上, 簡単なモデル自由エネルギーから, ラメラ層における相転移が記述できることを示した。リップル構造が現れる基本的な機構は, 主転移近傍で炭化鎖の配位 (秩序度) がゆらぐことによって, 上下層に秩序度に差が現れ, 負の曲げエネルギーが効果的に現れることである。