

semi-flexible 高分子鎖の折り畳み転移の速度論

京都大学理学部物理学第一教室 坂上 貴洋

e-mail: sakaue@chem.scphys.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

高分子鎖は良溶媒中では、 $R \sim N^{3/5}$ (R : 高分子鎖の広がりサイズ、 N : セグメント数) で特徴づけられるコイル状態をとるが、貧溶媒中では凝縮構造 (グロビュール) をとり、そのサイズは $R \sim N^{1/3}$ となる。この両状態間の転移 (凝縮転移、もしくはコイル-グロビュール転移) は物理のみならず、タンパク質の折り畳み、変性や DNA の高次構造変化など生物学的見地からも興味深く研究がされてきている。従来、高分子鎖の凝縮転移は、気相に相当するコイル状態から液相に相当する球状の凝縮体 (グロビュール) への転移と考えられてきたが、近年の理論・実験的研究により堅い高分子鎖はコイルから結晶相に相当する秩序構造へ転移することがわかってきた。ところが、一方で、凝縮転移の速度論についての理論的研究では、鎖の堅さの効果は殆ど考慮されてこなかった。

高分子鎖の堅さの指標としては、鎖に沿って角度相関が失われる長さを持続長と呼び、持続長がモノマー単位のサイズよりずっと長い (しかし鎖の全長よりはずっと短い) もの、同程度のものをそれぞれ semi-flexible 鎖、flexible 鎖と呼ぶ。今回、semi-flexible 鎖が、空間的に広がったコイル状態からどのような過程を経て秩序構造へと折り畳まれるかを、Brownian dynamics シミュレーションにより研究した。

2 モデル

semi-flexible 鎖の折り畳み過程の一般的な特徴を考察するために、単純なモデル (いわゆるバネ-ビーズ模型) を用いた。高分子鎖の全長は 512σ (σ : モノマー単位の直径) とし、また、堅さについては、隣り合うボンドのなす角度に依存する曲げポテンシャルにより導入し、持続長がおおよそ 10σ とした。溶媒環境は、モノマー単位間に作用する短距離型の相互作用ポテンシャル (具体的には、Morse ポテンシャル) により考慮した。

3 結果と考察

折り畳み構造としては、トロイド、ロッドの2種類が得られた。ここでは、トロイド構造が得られるときの特徴的な過程について議論することにする。図1は、最初ランダムコイル状態から始めて、トロイドが得られたときに、鎖のどの辺りに最初に凝縮部が形成され、それがどのように伝播していったかの典型例を示す。図2には、それに対応する鎖のコンフォメーション変化のスナップショットを示す。図1

から見て取れるように、貧溶媒環境下におかれた後、しばらくの間コイル状態は準安定状態として存続する。ある時、臨界核が形成されると、ほぼ等速度で残りのコイル部分を巻き取って成長していく。実験でも DNA の蛍光顕微鏡観察により、このほぼ等速度の成長過程が見られており、非常に興味深い。

以上のように、semi-flexible 鎖の折り畳み過程の速度論は、スピノーダル分解的過程により、連続的な密度変化を伴いながら折り畳まれるという flexible 鎖の凝縮速度過程とは質的に異なることがわかる。また、このような単一分子レベルでの折り畳み過程は、標準的な実験手法である散乱実験等では、分子集団の中に埋もれてしまい、観測できないであろうことを指摘した。

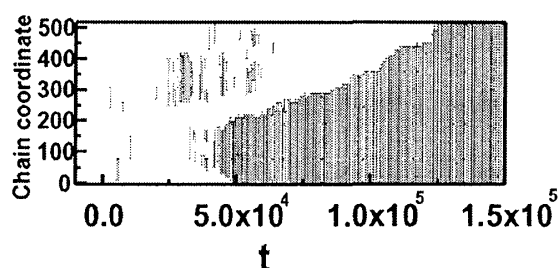


図 1: トロイド形成時の高分子鎖に沿ったモノマー単位局所密度の時間発展。縦軸は高分子鎖に沿った座標であり、影のついた部分、白い部分がそれぞれ凝縮部分、コイル部分を表す。

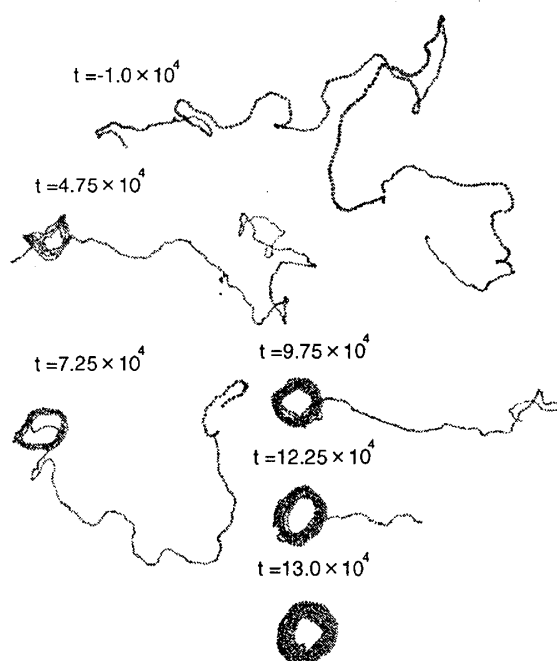


図 2: トロイド形成時のコンフォメーションの時間変化