

ゆらいでいる生体膜中での有効拡散係数

物質研基礎部、 関 和彦

生体膜は、脂質2重膜によって構成された2次元膜で、熱ゆらぎのために時々刻々と形を変えている。このような、ゆらいでいる膜面内での拡散係数は、熱ゆらぎで平均を取った有効拡散係数である。ゆがんでいない定常な形のなかでの拡散に比較して、この有効拡散係数は一般に小さくなる。これは、拡散は定常な形からのゆがみのために、山や谷を超えなければならず、平地を移動するのに比べるとあまり遠くへ行けないからである。逆に、有効拡散係数を求めれば、表面のゆがみ具合が分かることになる。本研究では、有効拡散係数と膜面のかたちのゆがみぐあい、いわゆる表面のラフネスとを理論的に関係付けることを目的とする。拡散の時間スケールが膜の形の変化の時間スケールよりもずっと小さい場合、拡散物質はある決まった形の上を拡散しているとみなす事ができる。以下、膜のサイズは大きく形の変化は拡散に較べて十分にゆっくりと起こっている場合を扱うことにする。さらに、膜面は平面のまわりでゆらいでおりこの平面の法線ベクトルを z 軸にとることにする。さらに膜面は平面の法線ベクトルについて、一価関数であり折り重なりはないと仮定する。膜面のゆがみ具合は、ゆがんだ膜面の法線ベクトル $\vec{n}$ とその空間相関であらわされる。ゆがんだ面のメトリックテンソルの行列式を g とすると、ゆがんだ面の法線ベクトルの z 成分は $n_z = \frac{1}{\sqrt{g}}$ である。我々はこの様なゆがんでいる膜の中で接平面での拡散は拡散係数 D_s で等方であるとし、ランジュバン方程式をたてて解析を行った。さまざまなゆがんだ面について平面上で距離 R まで到達する平均最少到達時間 $\langle t \rangle$ を用い、有効拡散係数 D_{eff} を、 $D_{eff} = R^2 / (4\langle t \rangle)$ から求める。最も単純な例として形のゆがみは等方的である場合を考察する。膜面のゆがみは同心円の形をしており、拡散はその同心円の中心から起こり、中心で完全反射、中心から距離 R のところで吸収する境界条件を課して、平均最少到達時間を求めた。この様にして、有効拡散係数として、

$$D_{eff} = \frac{R^2 D_s}{4 \int_0^R \frac{dr_1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 \left\langle \frac{1}{n_z(r_1)} \frac{1}{n_z(r_2)} \right\rangle} \quad (1)$$

を得た。ゆがみについて等方性を仮定してはいるが、そのような形状の有効拡散係数としては、一般的な表式である。膜面の平面からのゆがみが大変小さく、 $\langle n_z(\vec{r}) n_z(\vec{r}') \rangle \approx 1$ であるとき Eq. (1) はさらに簡略化され

$$D_{eff} \approx \frac{D_s}{6 - 8\langle n_z \rangle + 3\langle n_z^2 \rangle} \quad (2)$$

となる。

さて、ここで直感的な議論を試みる。拡散物質は、膜の形のゆがみに従い、山超え谷超えして起こるので、平面状への投影である有効拡散係数は、本来の拡散係数 D_s よりも小さくなる。小さくなる程度は、膜の局所的な面積 $\sqrt{g}$ の統計平均できまるはずであるので、 $D_{eff} = D_s / \langle \sqrt{g} \rangle$ つまり、

$$D_{eff} = \frac{D_s}{\langle \frac{1}{n_z} \rangle} \quad (3)$$

となると思われる。実際、有効媒質近似を用いて、Eq. (3) を導いたという報告があるが [1]、我々の表式 Eq. (1) からは、Eq. (3) は導けない。さらに、

$$D_{eff} \approx \frac{1}{2} D_s (1 + \langle n_z^2 \rangle) \quad (4)$$

と言う関係も導かれている [1]。これは、形のゆがみが大きいときにも、成り立つ関係であるとされており、ゆがみに空間相関がなくゆらぎが大きい時、 $\langle n_z^2 \rangle \approx 0$ となり、この時、形のゆがみは垂直方向の部分と平面内の部分が同程度に実現すると見なすことができるので、有効拡散係数が本来の拡散係数の半分程度になると、解釈されている。Eqs. (3)-(4) の表式は等方的とは限らない一般的なゆがみの形状のもとで導出されている。ここで、とりあげた等方的なゆがみの場合も含んでいるはずだが、結果が異なるのはこれらの式の導出の際の近似によると考えられる。実験では、膜の形のゆがみの変化の時間スケールが拡散の時間スケールと競合する場合の有効拡散係数が計られている [2]。このような場合の有効拡散係数を求めるのは今後の課題である。

References

- [1] S. Gustafsson and B. Halle, *J. Chem. Phys.* **106**, 1880 (1997).
- [2] Per-Ola Quist and B. Halle, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3689 (1997).