10510 異方的に形態変化する脂質分子膜モデルの研究

Monte Carlo Study of a Model of Anisotropic Morphological Changes in Membranes

○沼田 喜弥 (茨城高専) 山田 希 (茨城高専) 正 鯉淵 弘資 (茨城高専)

Yoshiya NUMATA, Nozomu YAMADA and Hiroshi KOIBUCHI
Ibaraki National College of Technology, Nakane 866, Hitachinaka, Ibaraki 312-8508

We present a numerical result of a geometric surface model for anisotropic membranes. In this model, a "tilt" is assumed on the surface. This tilt represents a three-dimensional degrees of freedom of lipid molecules and is an analogue of "the spin variable" in the ferromagnetic models. We see a multitude of anisotropic phases in the model, and find that the reason of this multitude is a dependence of the bending energy and surface tension on the position and the direction of tilts.

Key Words: Geometric Surface model, Anisotropic phase, Anisotropic Membranes, Tilt, Monte Carlo

1 緒言

ミセル, ベシクルなどの脂質分子膜は, 周囲の温度や圧力の影響を受けることで, 様々な形状に形態変化することが知られている [1]. この膜の形態変化については, 化学的, 工学的な観点から実験的, または数値的に研究が行われている.

このときの膜モデルとしては, 曲げエネルギーと面積エネルギーによって定義されたモデルが一般的に仮定される. このような膜モデルを用いて, これまでに数値的に解明されていることとしては, 「膜の等方的な形態変化は相転移現象である」ことが挙げられる. しかし, 実験的研究で明らかにされている膜の異方的な形態変化は, これまでの膜モデルでは説明が困難である [2].

そこで, 本研究では, 形態変化の工学的応用に向けて理解を深めるために, 非等方的な膜の形態変化についてモデル化を行う. この膜モデルは, 膜表面に tilt と呼ばれる 3 次元自由度 [3] をエネルギー関数に取り入れ, 異方的なフインセラ幾何学 [4] に基づいて構成されたものである.

数値計算には統計力学に基づく Monte Carlo 法を用いる.

2 膜のモデル

Fig. 1: (a) The tilts $\vec{\sigma}$ at the vertices of triangulated surface, and (b) the tilt $\vec{\sigma}$ at the vertex 1 of a triangle.

Fig.1(a) に示すように膜表面に tilt と呼ばれる膜分子の自由度を仮定する. tilt は 3 角形分割された球面上の各 3 角形の頂点に存在するものとし, 膜面内の単位ベクトル $\vec{\sigma}$ で表わす. ハミルトニアン S は S_1, S_2, S_3 の 1 次結合として

$$\begin{aligned} S(X, \sigma) &= S_1 + bS_2 + \lambda S_3, \quad S_1 = \sum_{\Delta} S_1(\Delta), \\ S_2 &= \sum_{\Delta} S_2(\Delta), \quad S_3 = \sum_{\Delta} S_3(\Delta), \\ S_1(\Delta) &= \sum_{(ij)} \left[\frac{v_{12}}{v_{13}} (X_3 - X_1)^2 + \frac{v_{13}}{v_{12}} (X_2 - X_1)^2 \right], \\ S_2(\Delta) &= \sum_{(ij)} \left[\frac{v_{12}}{v_{13}} (1 - \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{n}_1) + \frac{v_{13}}{v_{12}} (1 - \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{n}_2) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

$$S_3(\Delta) = \sum_{(ij)} \left[\frac{v_{12}}{v_{13}} (1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3) + \frac{v_{13}}{v_{12}} (1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \right],$$

と表わされる. ここで, S_1 は全てのボンドの長さの 2 乗の和であり, 表面張力またはボンドポテンシャルと呼ばれる. S_2 は隣接する 3 角形の単位法線ベクトルの内積によって定義され, 曲げエネルギーと呼ばれる. S_3 は隣り合う $\vec{\sigma}$ の内積によって定義される. これは $\vec{\sigma}$ の配向性を表わすエネルギーであり, 磁性体モデルにおけるスピン内部エネルギーに相当する. v_{12}, v_{13} は, Fig.1(b) に示すように, $\vec{\sigma}$ の 12 方向, 13 方向成分である. 係数 b は曲げ剛性, λ は tilt の配向性の強さを表わすパラメータである. また, S_1 の係数である表面張力 a は $a=1$ としている. $v_{12}/v_{13}, v_{13}/v_{12}$ は $\vec{\sigma}$ の「向き」によるため, 膜面上の「場所と方向」に依存して変化する. つまり, 曲げ剛性や表面張力, tilt の配向性の強さが膜面上の場所と方向で変化するということである.

3 計算結果

Fig. 2: Snapshots of surfaces and the surface sections at (a) $\lambda = 0.4$ (sphere), (b) $\lambda = 2$ (disk), (c) $\lambda = 10$ (tube), and (d) $\lambda = 50$ (sphere).

初めに Fig.2 に, 曲げ剛性 $b = 300$ のもとで λ を変化さ

せて得られた膜の snapshot を示す。なお、 λ を大きく (小さく) することは温度を下げる (上げる) ことと同じである。Fig.2(a),(b),(c),(d) は、 $\lambda = 0.4, 2, 10, 50$ のときの膜の形状で、それぞれ、球面状、円盤状、柱状、球面状になっている。これらの形態変化が相転移であるかどうかを調べるために、いくつかの物理量の解析を行い結果を示す。

Fig. 3: (a) The magnetization M vs. λ , (b) the tilt energy S_3/N_T vs. λ , where N_T represents the total number of triangles. N denotes the total number of molecules.

Fig.3(a) と Fig.3(b) には

$$M = |\sum_i \vec{\sigma}_i|/N \quad (2)$$

で定義される「磁化」と、1つの3角形あたりのエネルギー S_3/N_T を示す。ここで、 M は tilt の自由度 $\vec{\sigma}_i$ の総和をその数で割ったものであるが、 $\vec{\sigma}_i$ が磁性体のモデルにおけるスピン変数に相当するため、 M を「磁化」としている。 $\lambda \leq 1$ では $\vec{\sigma}$ は配向性がない無秩序な状態となるため、磁化は $M \rightarrow 0$ となり、エネルギーは $S_3 \rightarrow 1$ のように大きくなる。 λ を増加させていくと、隣り合う $\vec{\sigma}$ は同じ向きに配向するようになり、 $S_3 \rightarrow 0$ となる。このとき、 M が不規則に上下しているのは、膜が Fig.2(b),(c) に示すような柱状か円盤状になるからである。実際、円盤状では tilt が渦を巻くため、 $\vec{\sigma}_i$ が cancel して $M \rightarrow 0$ となる。この渦巻きの状態は、磁性体モデルにおける KT 相に相当する。さらに、 $\lambda \geq 20$ になると、エネルギー S_3 が不連続的に高い値を示すように変化する。このとき、 M は再び $M \rightarrow 0$ となる。

Fig. 4: (a) The maximum length of surface L_{max} vs. λ , (b) the minimum length of surface L_{min} vs. λ .

Fig.4(a),(b) には膜の最大長さ L_{max} と最少長さ L_{min} を示す。 L_{max} は文字どおり膜の最大の長さである。 L_{min} は次のように求める。初めに最大長さ L_{max} を決める軸に垂直な面で膜の中心を通る断面を求める。次にその断面上で最大となる長さを求め、この軸と初めの最大長さの軸の両方に垂

直な軸と膜の交点を求める。この交点間の距離が L_{min} である。 $\lambda \leq 1$ と $\lambda \geq 20$ では L_{max}, L_{min} はほぼ同じ値になり、Figs.2(a),(d) のように膜が球状であることを反映している。一方、 $1 < \lambda < 20$ においては L_{max}, L_{min} は大きく異なる。これは Fig.2(b),(c) に示す柱状または円盤状のような非球面の形状を反映している。つまり、 $L_{max} = L_{min}$ は球面、 $L_{max} \neq L_{min}$ は非球面に対応する。ここで特筆すべきことは、 $\lambda = 20$ 付近において L_{max}, L_{min} が不連続に変化していることである。これは「エネルギー S_3 ($\leftrightarrow$ tilt の配向性) の相転移が膜形状に影響を及ぼす」ことを示している。

Fig. 5: (a) The mean square size X^2 vs. λ , (b) The volume V vs. λ .

Fig.5(a) には

$$X^2 = \sum_i \langle (X_i - \bar{X})^2 \rangle / N \quad (3)$$

で定義される膜の平均 2 乗サイズ、Fig.5(b) には膜の体積 V を示す。 L_{max}, L_{min} と同様に膜の大きさを表わす X^2 や V においても、 S_3 が不連続に変化する λ で不連続的な変化が生じることが分かる。

4 結言

数値シミュレーションによって得られた結果は以下のとおりである。

- (1) 膜の外部自由度である tilt を Finsler 計量に取り入れることで従来の膜モデルを拡張すれば、異方的に形態変化する膜を説明することが可能と考えられる。
- (2) この新しい膜モデルでは、表面張力と曲げ剛性ばかりでなく、tilt の配向性の強さを表わすパラメータも「場所と方向に依存して変化する」ものとしている。その結果、配向性の強い領域において、tilt の相互相関は不連続に変化し、この tilt の相転移は膜の形の非球面・球面の形態変化に反映される。相転移が起こる $\lambda \geq 20$ ($\leftrightarrow$ 低温) の相では、tilt はほとんど動揺せずにランダムな状態のまま固定される。

今後の課題としては、低温で見られる特別な相転移について、磁性体モデルとの照合を行い原理を解明することである。謝辞 この研究の一部は長岡、豊橋技術科学大学の高専連携教育研究資金の補助を受けた。

参考文献

- [1] D. Nelson, in Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces, Second Edition, edited by D. Nelson, T. Piran, and S. Weinberg, (World Scientific, 2004), p.1.
- [2] H. -G. Döbereiner and U. Seifert, Europhys. Lett. **36** (1996) pp. 325-330.
- [3] 松本誠, 「計量微分幾何学」裳華房 (1975).
- [4] 沼田, 鯉淵, 異方的に形態変化する脂質分子膜の幾何学的モデル化, 機械学会茨城講演会講演論文集, (2012-8), pp. 1-2.