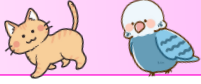


切断可能なバネによる粘弾性相分離を用いたタンパク質の自己組織化ダイナミクス



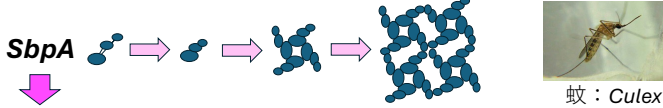
明治大学 総合数理学部 現象数理学科 池田研究室 4年



1. 序論

S-Layerタンパク質の自己組織化とは？

多様な格子対称性や細孔サイズをもつ 二次元結晶性ナノ構造体を自己組織的に形成



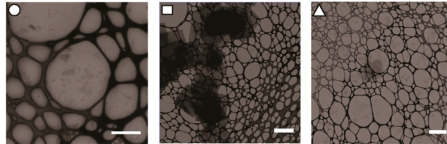
蚊: *Culex*

細菌 *Lysinibacillus Sphaericus* のタンパク質

駆除

○先行研究 I

Ca²⁺などのイオン濃度によってタンパク質の自己組織化が変化することが確認された。



Ca²⁺濃度 (○ 0.25 mM, □ 5 mM, △ 150 mM)

2. 粘弾性相分離

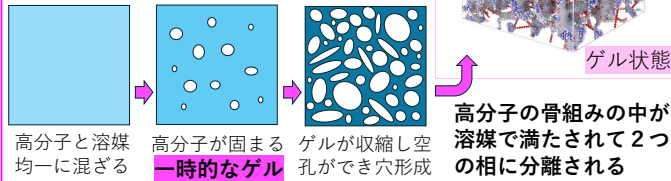
遅い成分

- ・高分子、DNA
- ・コロイド
- ・タンパク質

速い成分

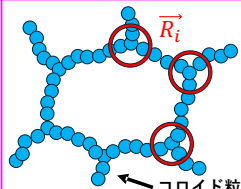
- ・水、溶媒

色が濃いほど高い 高分子濃度を表す



ゲル状態

3. 数理モデル



コロイド粒子の鎖状構造を一時的ゲルと仮定して粘弾性相分離として考える。小さな粒子からなるネットワークを粗視化、擬似粒子として近似しそれらを切断可能なバネで結合して表現

○粗視化粒子 i の運動方程式

$$\zeta \frac{d\vec{R}_i}{dt} = -\frac{\partial U_{tot}(\vec{R}_i)}{\partial \vec{R}_i} + \vec{\xi}_i$$

\vec{R}_i : 粒子 i の位置ベクトル
 ζ : 摩擦係数
 $\vec{\xi}_i$: ノイズ項

\vec{R}_i の時間変化 ポテンシャルエネルギー U の \vec{R}_i における勾配

$$U_{tot}(\vec{R}_i) = U_{LJ}(\vec{R}_i) + U_{sp}(\vec{R}_i)$$

レナードジョーンズポテンシャル

全ての (R_i, R_j) について 粒子間の引力・斥力

$$U_{LJ}(R_i) = 4\epsilon \sum_{j \neq i} \left[\left(\frac{\sigma}{|R_i - R_j|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{|R_i - R_j|} \right)^6 \right]$$

ϵ : 粒子の大きさ, σ : 相互作用の強さ

スプリング相互作用項

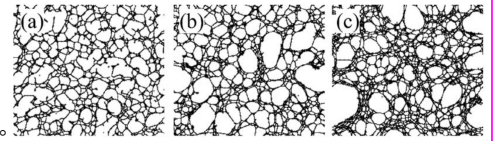
隣接する全ての (R_i, R_j) について バネのエネルギー

$$U_{sp}(R_i) = \frac{1}{2} \kappa \sum_{j \in (i)} |R_i - R_j|^2$$

κ : バネ係数

○先行研究 II

左図の(a)~(c)は、本モデルにおける粘弾性相分離のシミュレーション結果である。



温度やバネの自然長の長さ、切断までにかかる時間、摩擦係数などによって、形状が異なることを示した研究。

Column

運動方程式って $F = ma$ の形じゃないモ?

極めて m が小さい上に、粘性が強過ぎて ma が 0 になってしまうからなんだ! γ

4. 目的

イオン濃度によって制限されるタンパク質 Sbp A の自己組織化ダイナミクスを、粘弾性相分離とみなし、本数理モデルに適用する。

5. シミュレーション

2つの粒子の場合 粗視化粒子 i の運動方程式を簡単にすると

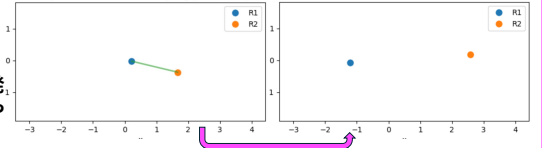
$$\zeta \frac{d\vec{R}_1}{dt} = -48\epsilon\sigma^{12} |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|^{-13} + 24\epsilon\sigma^6 |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|^{-7} + \kappa(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$$

$$\zeta \frac{d\vec{R}_2}{dt} = -48\epsilon\sigma^{12} |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|^{-13} + 24\epsilon\sigma^6 |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|^{-7} + \kappa(\vec{R}_2 - \vec{R}_1)$$

数値解析手法 : ルンゲ・クッタ法

① 切断される

- * 温度 T が高いと反発して切れやすい

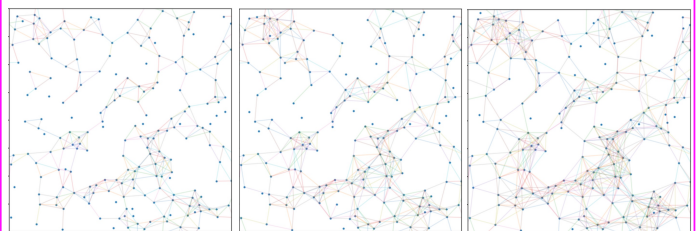


② 維持される

- * 相互作用の強さ σ ↑
- * 温度 T ↓
- * 摩擦 ζ ↑



200個の粒子の場合



「切れやすい」 ← → 「切れにくい」

粘弾性相分離のようなシミュレーションができていますが、壁の持つエネルギーが弱く、粒子が枠外に飛び出していました。完全には再現できていないが、パラメータや条件次第でもう一步のところまで来ていると思います。すみません。すみません

6. 結論 & 今後の展望

* SbpA の結晶成長ダイナミクスにおいて、粘弾性相分離で提案された数理モデルを用いて、一部再現することができた。

* その他のパターンについて、線の太さや網の大きさを同数理モデルで、どのように再現すればいいのかを試行錯誤する。