

ベシクルの分裂シミュレーション

山口大院創成科学 ○浦上直人

【はじめに】

生命現象において、細胞分裂は最も重要なプロセスのひとつである。細胞が分裂する際、これまで様々なタンパク質が関与していることが分かっている。しかしながら、近年、L 型菌と呼ばれる細胞壁をもたないバクテリアは、分裂するために重要となるタンパク質が無くても分裂することが報告されている¹⁾。こうした L 型菌の分裂形態は、初期の生命に非常に近いとされてきた^{2,3)}。一方、シリンダー型と逆コーン型の 2 種類の脂質で構成したベシクルは、タンパク質が存在しなくても、温度上昇による膜面積の増加によって分裂することが報告されている^{2,3)}。これらの実験結果は、ある物理的条件が満たされることで細胞分裂することが可能であることを示唆している。そこで本研究では、分子動力学シミュレーションによりベシクル分裂を再現し、分裂するために必要な物理的条件を明らかにすることを目的とする。

【シミュレーション方法】

脂質分子を親水性 2 粒子、疎水性 4 粒子をもつ直鎖上分子とし、脂質を構成する粒子の大きさを変えることで、シリンダー型と逆コーン型脂質をモデル化した。水分子は親水性 1 粒子とした。シリンダー型脂質分子を 5,200、逆コーン型脂質分子を 1,300、合計 6,500 の脂質分子でベシクルを構成し、水分子数 211,000 を配置した系で、温度・圧力一定のシミュレーションを行った。シミュレーションポテンシャルは Markvoort ら⁴⁾のものを参考にした。

【結果と考察】

Fig. 1 にシミュレーションで再現したベシクル分裂の様子を示す。Fig. 1(a) は初期状態であり、洋ナシ型のベシクルを使用した。ベシクル内の水分子数は 13,376 とし、2 分子膜の外側と内側の脂質分子数差は $\Delta N = 2,384$ とし、2 分子膜の内側に逆コーン型の脂質分子を多く配置した。時間経過とともに洋ナシ型のベシクルのネック部分が細くなり、ベシクル内の水分子が 2 つの領域に分かれ、ベシクルは stalk でつながった limiting shape に変化した(Fig. 1 (b))。その後、stalk が切れ、ベシクルの分裂を再現することができた(Fig. 1 (c))。当日は、ベシクル分裂に関する詳しい解析結果を紹介する予定である。

【参考文献】

- 1) M. Leaver, P. Dominguez-Cuevas, J. M. Coxhead, R. A. Daniel, and J. Errington, *Nature*, **457** (2009) 849
- 2) Y. Sakuma and M. Imai, *Phys. Rev. Lett.*, **107** (2011) 198101.
- 3) T. Jimbo, Y. Sakuma, N. Urakami, P. Ziherl, and M. Imai, *Biophys. J.*, **110** (2014) 1551.
- 4) A. J. Markvoort, *et al.*, *Biophys. J.*, **99** (2010) 1520.

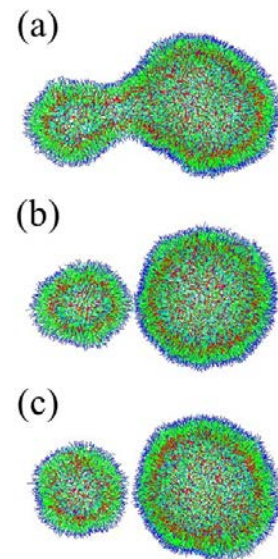


Fig. 1 Simulation snapshots for vesicle division. (a) Initial state, (b) limiting shape, (c) vesicle division.