

4P016

電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される 負圧の分子論的解明

(¹名大院工) ○島航平¹, 藤本和士¹, 篠田渉¹, 岡崎進¹

The molecular theory elucidation of negative pressure inside a spherical shell in electrolyte solution

○Kouhei Shima¹, Kazushi Fujimoto¹, Wataru Shinoda¹, and Susumu Okazaki¹

¹Department of Materials Chemistry, Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya

【Abstract】 Molecular dynamics (MD) calculations for the systems mimicking an empty poliovirus in the solution have been performed to investigate the origin of negative pressure in the empty poliovirus capsid. Each system contains a negatively charged spherical shell with radius 0.2 nm and monovalent ions.

The local pressure inside the sphere was negative, and the larger the charge of the spherical shell, the more the absolute value of negative pressure increased. Thus, the pressure inside the spherical shell is negative. From these model calculations, we concluded that the negative pressure inside the empty poliovirus capsid comes from the charged capsid. Furthermore, MD calculation of the system in which chloride ions were confined in the charged spherical shell instead of RNA has also been performed. The result showed that the pressure inside the sphere is positive. Therefore, the charged sphere system was stabilized by confining chloride ions.

【序】

ウイルスは、RNA または DNA とそれを包んでいるカプシドと呼ばれるタンパク質の殻から構成されている。カプシドは RNA や DNA を周囲の環境から守る役割を果たしている。我々が行った空のポリオウイルスカプシドの全原子分子動力学(MD)計算の結果、カプシドの内部の圧力は負の値を示していることを報告した[1]。本研究では、発生したこの負圧の起源を明らかにするために、負圧であるカプシド内部は負に帯電したカプシドに覆われている特異な環境であることに注目し、カプシドを一様に帯電した球殻とみなした。この球殻と 1 価イオンからなる電解質水溶液の系をカプシド系のモデルとして、様々な球殻電荷で MD 計算を行い、局所圧力の計算を行った。さらに、RNA が閉じ込められたポリオウイルスを模倣するために、RNA の代わりに塩化物イオンを帯電球殻内に閉じ込めた系についても MD 計算を行った。

【方法】

ポリオウイルスカプシドのモデルとして、半径 20Å で表面電荷の総和 Q が 0e、-5e、-10e、-20e、-40e となるような一様に帯電した球殻を含む 5 種類の系を準備した。さらに、球殻($Q = -5e$)内に RNA の代わりとして Cl^- イオンを閉じ込めた系を 1 つ準備した。以前の全原子 MD 計算で、水溶液条件はリン酸緩衝水溶液濃度に設定したので、本研究では同じイオン強度となるように、 Na^+ と Cl^- の 1 価イオンから成る電解質水

溶液とした。系全体として、水分子 19525 個、Na⁺ 58 個、Cl⁻ 58 個に加えて、球殻電荷 Q を打ち消すカウンターイオンとして追加した Na⁺ で構成されている。原子間相互作用を表す力場として水分子には TIP3P を、イオンには CHARMM36 を採用した。NVE、NVT アンサンブルでの平衡化後、圧力 P = 1atm、温度 T = 310.15K の NPT アンサンブルにて、MD 計算を行い、局所圧力を計算した。Lennard-Jones 相互作用は 12 Å でカットオフし、静電相互作用による長距離力は高速多重極展開法(FMM)で計算した。MD 計算はソフトウェア MODYLAS[2]を使用した。また、局所圧力 P_α はビリアル定理に基づく式[3]

$$P_{\alpha} = \frac{N_{\alpha} k_B T}{V_{\alpha}} - \frac{1}{3V_{\alpha}} \sum_i^{N_{\alpha}} \sum_{j \neq i}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}$$

で計算を行った。N_α は体積 V_α 中での粒子数で、k_B はボルツマン定数、N は全粒子数である。

【結果・考察】

各表面電荷密度球殻系の局所圧力プロファイルを Fig.1 に示す。Q = 0e の時は、全ての領域にわたり設定圧力 1atm になっている。しかし、その他の Q では、局所圧力は球殻内部では負の値を、球殻外部では正の値を示した。また、球殻表面付近では複雑なプロファイルとなった。この結果はポリオウイルスカプシドの全原子 MD 計算の結果と同様である。さらに、球殻の表面電荷 Q の絶対値が大きくなるにつれ、球殻内部の負の圧力も大きくなっていった。つまり、ポリオウイルスカプシド内部が負圧になった要因は、カプシド表面が負に帯電していることである。

球殻(Q = -5e)内に Cl⁻イオンを閉じ込めた系では球殻内部の局所圧力が正の値を示した。負の圧力は熱力学的に不安定な状態であり、球殻内部に Cl⁻イオンが存在することにより正圧になり、安定な状態になったと考えられる。このことから、空のカプシドは RNA が内部に入り込むことにより安定化すると考えられる。

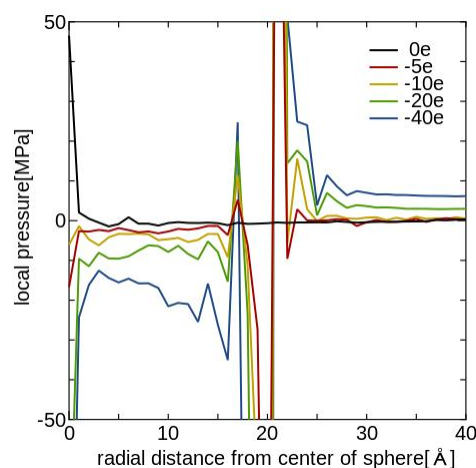


Fig. 1. The local pressure profiles of systems with a spherical shell with various charges

【参考文献】

- [1] Y. Andoh *et al.* *J. Chem. Phys.* **141**, 165101(2014).
- [2] Y. Andoh *et al.* *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 3201(2013).
- [3] Z. S. Basinski, M. S. Duesbery, and R. Taylor. *Can. J. Phys.* **49**, 2160(1971).