

電解質溶液中の負に帯電した生体分子間の相互作用に 多価陽イオンが与える影響

九大院理

○末松安由美, 秋山良

Effect of multivalent cation on interactions between negatively charged biomolecules

○Ayumi Suematsu, Ryo Akiyama

² *Department of Chemistry, Kyushu University, Japan*

【Abstract】

Negatively charged biomolecules immersed in an electrolyte solution, such as cytoplasm, interact each other. The effective interaction depends on not only electrolyte concentration but also the charge of cation. In our previous studies the biomolecules have been modeled as the large anionic particles. However, effective potential calculated using the model did not agree with the experimental results qualitatively. We assumed that the effective attractive interaction between biomolecules attributed the effective interaction between oxygen atoms in the dissociated carboxylic acidic groups on the surface of biomolecules. Our calculation results by using HNC-OZ indicated that only multivalent cations mediated a strong effective attraction between O-sized anions at a certain concentration. The concentration dependence for multivalent cations concluded as follow. The effective interaction turned from repulsive to attractive as the electrolyte concentration increased, and the effective attraction decreased when more electrolyte was added. These behaviors agreed with experimental results for reentrant condensation of acidic proteins in various electrolyte solutions.

【序】

電解質溶液中の負に帯電した生体分子は、電解質の価数および濃度によって実効的な相互作用が変化する。Zhang ら[1]は、多価カチオンを含む電解質溶液の濃度を上げていくとタンパク質がリエントラントな凝集挙動を示す実験を報告している。つまり電解質溶液濃度を上げていくとタンパク質が一度凝集し、再度溶解するリエントラントな挙動を示す。この挙動は電解質に多価カチオンが含まれない場合には見られない。秋山らはこのリエントラントな相挙動に対し、生体分子を負に帯電した巨大粒子としてモデル化した計算を行った[2]。彼らの積分方程式理論による計算では、巨大荷電粒子間の実効相互作用は濃度が上がるにつれて斥力、引力、また斥力と変化し、リエントラントな相挙動を再現した。ところが、この実効相互作用の変化は多価カチオンが含まれない場合にも起こったため、実験とは違った結果となった。また田村ら[3]は自由体積理論を用いて同様のモデルでの自由エネルギーの計算を行った。その結果、実効相互作用の遠距離での斥力テールが大きいため相分離を起こすことが難しいと考えられることを報告している。これらの研究から、リエントラントな相挙動のメカニズムを解明するのに、生体分子を巨大荷電粒子としてモデル化することが不十分であることが明らかになった。

【方法 (実験・理論)】

本研究では、電解質中のタンパク質の酸性残基に含まれる酸素 O に注目する。適切な電解質濃度ではこの酸素が引力パッチとしてはたらくと考え、その酸素-酸素粒子間相互作用を見積もる事とした。モデルとして、酸素サイズ程度の負に帯電した剛体球を用いる。また、イオンについても同様にマグネシウムイオンおよび塩素イオンの大きさの荷電粒子としてモデル化する。

荷電粒子間相互作用の計算には積分方程式理論(HNC-OZ)を用い、カチオンの価数依存性を調べる。積分方程式理論を用いることで、粒子の大きさや価数、多体相互作用も考慮することができる。各カチオンの価数ごとに電解質濃度を変化させて、粒子間相互作用がどのように変化するかを調べる。

【結果・考察】

Fig.1 に電解質中に含まれるカチオンが 1 価および 2 価の場合の平均力ポテンシャルを示す。1 価の場合 (Fig.1 (a))、電解質濃度が増加すると引力はどの距離においても平均力ポテンシャルは単調に減少した。一方 2 価の場合 (Fig.1 (b))、濃度が $1 \times 10^{-1} \text{M}$ までは単調に減少するが、 1M の場合は再度増加した。また、会合時の安定性は 1 価の場合に比べて大きい。また、濃度が上がるにつれて遠距離での斥力テールが消えていくこともわかった。

結果から、2 価のカチオンの場合には相互作用がリエントラントな振る舞いをし、1 価の場合にはそれが起こらないことが示された。また、凝集を阻害すると考えられていた斥力も多価カチオンが含まれていればかなり小さくなることが示された。

本発表のポスターでは、粒子の表面間距離がゼロの場合の平均力ポテンシャルが濃度によってどのように変化するか、またそのカチオンの価数依存性の変化についても議論を行う。さらにカチオンを、イットリウムを想定したサイズとモデル化した場合についてもマグネシウムイオンの場合と同様に計算した結果を示す。マグネシウムイオンサイズの場合と比較して、平均力ポテンシャルがどのように変化するかについても議論を行いたいと考えている。

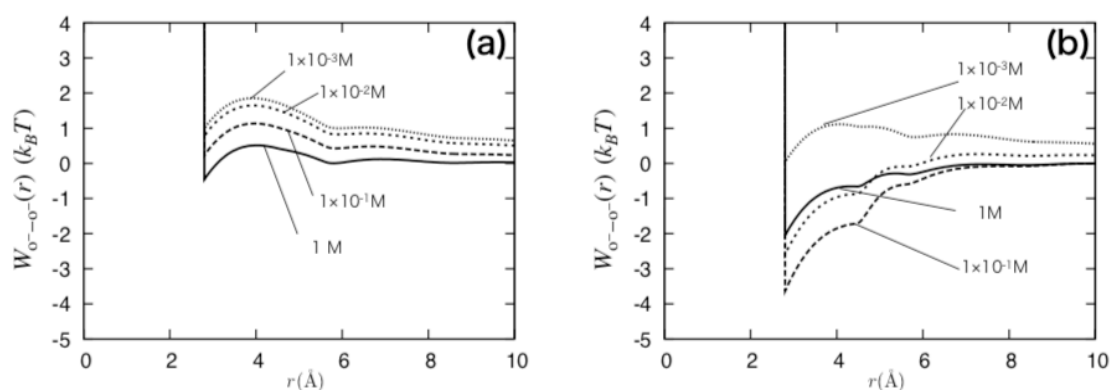


Fig. 1. Potential of mean force between macroanions in electrolyte solution. (a) Cation in solution is monovalent, (b) Cations in solution is divalent.

【参考文献】

- [1] F. Zhang *et al.* *Proteins*. **78**, 3450–7 (2010)
- [2] R. Akiyama and R. Sakata, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 123602 (2011).
- [3] 田村雄大, 末松安由美, 吉森明, 秋山良: 物理学会秋季大会2017ポスター