

重水および軽水で水和させた生体脂質モノオレイン両相連続立方相の構造解析—重水置換効果を探る—

高橋 浩

群馬大学大学院 理工学府 理工学基盤部門

重水 (D_2O) と、通常の水、つまり、軽水 (H_2O) とでは、粘度や融点などが僅かに異なるだけで、ほぼ同じ性質を示す。しかしながら、軽水を重水に置き換えると、種子の成長速度、概日リズム、細胞増殖などの様々な生物学的プロセス・機能に影響する。その重水置換効果の分子機構はいまだに良くは理解されてはおらず、その解明を目指して、様々な生体分子系で重水置換効果が調べられてきている。

多くの球状タンパク質で、重水置換は、構造安定性を向上させ、折り畳み構造をよりコンパクトにすると報告されている。

細胞膜の主要骨格である脂質膜系に関しては、重水置換によりゲル・液晶相転移の温度が数度変化することが知られている。一方、構造に対しての重水置換効果は、一般には弱く、ラメラ構造（積層した膜の周期的な繰り返し構造）系では、そのラメラ周期が、測定誤差を僅かに上回る程度減少することが指摘されている[1]。我々は、ラメラ系と比較して、立方（キュービック）相構造などの非ラメラ系では、より重水置換効果の影響が強く、大幅に格子定数が減少することを見出した[2]。

特に変化が大きかった完全に水和したモノオレイン（MO）系の両相連続立方（ $Pn3m$ ）相で、その無配向系の小角 X 線回折（一種の粉末回折）のデータ（図1）を使って重水置換による構造変化をより詳細に調べた。解析は、簡単な構造モデルを構築し、そのモデルから計算される X 線回折強度と観察強度を比較することで行った。解析における仮定等の詳細は講演の際に述べる。その結果、図2に示したよう、 $Pn3m$ の両相連続立方相では、 H_2O を D_2O で置き換えると、水界面における MO 一分子あたりの占有面積が、約 12% 減少することが明らかとなった[3]。脂質膜系では、分子動力学（MD）シミュレーション研究によって、重水による占有面積減少効果が予言されている[4]が、実験的にそれを示したのは、筆者の知る限り本研究が初めてである。背景にある分子機構についても講演では触れる予定である。

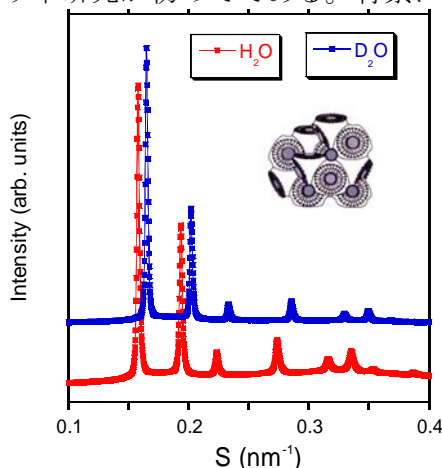


図1 重水および軽水中の MO の X 線回折パターン

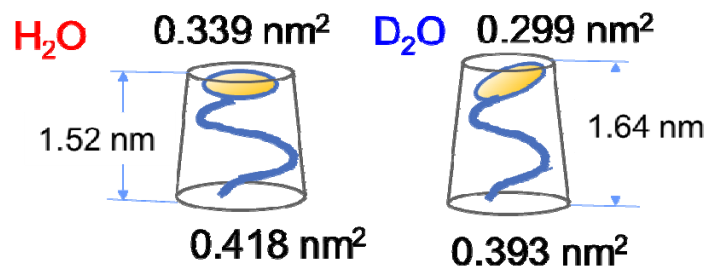


図2 解析の結果得られた重水および軽水中の $Pn3m$ 相における MO 分子の構造パラメータ

1. 例えば Y. Kobayashi, K. Fukuda, *Chem. Lett.* **27** (1998) 1105–1106.
2. H. Takahashi, K. Jojiki, *Chem. Lett.* **41** (2012) 1101–1103.
3. H. Takahashi, K. Jojiki, *Chem. Phys. Lipid* **208** (2017) 52–57.
4. T. Róg *et al.*, *J. Phys. Chem. B* **113** (2009) 2378–2787.