

# 論文審査の結果の要旨

氏名 巫 浩

本論文は 8 章からなる。第 1 章は序論であり、本論文の研究の動機と論文全体の構成について概要が述べられている。第 2 章は、生体膜や実験室で作られる人工膜の構造、化学組成、様々な物性（ラフト、相分離など）についてまとめられている。第 3 章には、これまで生体膜と高分子研究で用いられてきた理論・シミュレーションに使われるモデルや、高分子の性質、片末端が膜に固定化した高分子が生体膜に与える影響について述べられている。

第 4 章では、本論文で使われたモデル化、シミュレーション法、それによって得られた基本的な性質について述べられている。生体膜のモデルとしては、数十分子からなると思われる膜のパッチを 1 粒子であらわすという大規模な粗視化を行ったメッシュレスモデルを用いている。モデルにおける相互作用として、排除体積効果を取り入れる Stillinger-Weber 型のソフトコア項、疎水効果を取り入れるための多体引力項、表面張力項などが考慮されている。また第 7 章で考慮される相分離のために、異なる膜粒子間では反発力も考慮されている。このようなモデルであらわされる生体膜にフレキシブルな線型高分子が固定化した状態が、ランジュバン方程式の数値解によってシミュレーションされることが説明されている。

第 5 章は、円筒状の膜の外側に高分子がシステムのシミュレーション結果が、曲げ剛性と自発曲率に関する結果を中心に記述されている。曲げ剛性と自発曲率の高分子密度依存性は、スケーリング理論とほぼ一致することが示される等、

モデルの妥当性が検証されている。

第 6 章は、2 つのエッジを持つ生体膜の線張力について述べられている。膜片での線張力が高分子密度の増加とともに非線形に減少することが示されているが、これは高分子グラフトがベシクル化やミセル化を引き起こすという実験結果とつじつまが合っている。これまでこのような系のシミュレーションは行われていなかった。また、理想鎖については、平均場近似を用いて、理論的に線張力が下がる機構を説明しており、シミュレーション結果とよい一致を得ている。

第 7 章では 2 成分系の生体膜系で、高分子鎖は一方の成分にしか修飾しないケースを対象とし、高分子密度の増加によって大きな相分離ドメインが不安定化し、小さなドメインに分裂する過程を観察している。高分子修飾によってドメインの大きさを制御可能であることを示したことは、この研究の新規性として評価できる。また、これによって初めてシミュレーションと実験の比較も可能になったことも重要な点である。最後に第 8 章では、全体のまとめと今後の展望について述べられている。

この論文で用いられた生体膜－高分子系のモデルは、示された例において系の物性を表すことに成功しており、今後更により複雑なシステムに研究が展開していくことが期待できる。なお、本論文第 4 章以降は野口博司、芝隼人との共同研究であるが、これらにおいても論文提出者が主体となって分析及び検証を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。