

# せん断流れ場中の細胞膜の不安定化\*

## －分子動力学計算による系のサイズ依存性の検討－

大阪大学 大学院基礎工学研究科 衝撃科学共同研究講座 奥山直人

目的：細胞への流れ場の作用により、細胞膜が不安定化することが、分子動力学計算による検討により報告されているが、細胞サイズにおいてどの程度のせん断速度で不安定化するかは明らかになっていない。このせん断速度値を見積もるため、分子動力学計算による細胞サイズへの外挿を行った。

内容：粗視化分子動力学計算法を用いて、膜が不安定化するまでせん断速度を変化させることにより、せん断速度閾値を算出した。さらに系のサイズを2～8倍とし、対応するせん断速度閾値を求め、それらと系のサイズとの関係を外挿することにより、細胞サイズにおけるせん断速度閾値を見積もった。

結果：細胞サイズにおけるせん断速度閾値は約 $80\mu\text{s}^{-1}$ と見積もられた。溶血現象を引き起こすせん断速度閾値と比較すると、見積もられた値は数百倍大きく、膜の不安定化は非生理的な条件でしか起こらないのだろうと推定される。

利用した計算機：VCC  
ノード時間：約 $10^4$   
使用メモリ：60GB/job  
ベクトル化率：—  
並列化：16並列

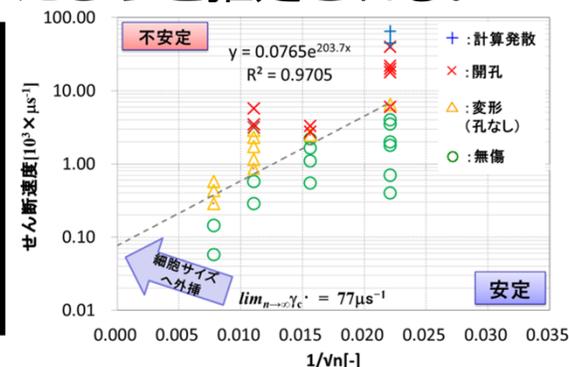
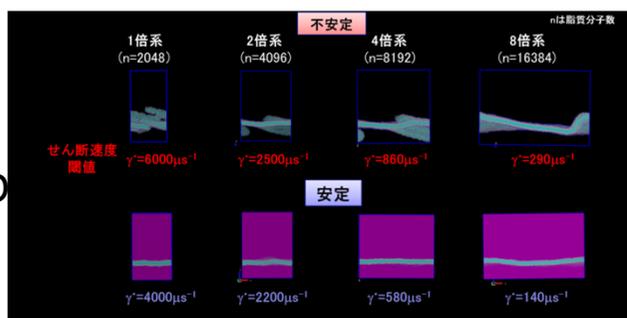


図1 各サイズにおけるせん断速度閾値 図2 サイズとせん断速度閾値との関係

\*本研究は大阪大学大学院基礎工学研究科和田成生教授、越山顕一郎招へい准教授および大阪大学国際医工情報センター重松大輝特任助教との共同研究である。