

脂質二重膜と膜タンパク質の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulations of lipid bilayers and membrane proteins

慶應大理工¹ [○]泰岡 顕治¹, 山本 詠士¹

Keio Univ.¹, [○]Kenji Yasuoka¹, Eiji Yamamoto¹

E-mail: yasuoka@mech.keio.ac.jp

生体膜は様々な種類の脂質分子やタンパク質で構成されており、膜内における生体分子同士の特異的な相互作用や分子拡散は、膜を介した情報伝達・物質輸送機構において重要な働きをしている。また、生体膜近傍のタンパク質や水分子、イオンなどの輸送も細胞の機能維持に関わっている。

我々は、脂質二重膜とタンパク質系に対する全原子・粗視化モデルを用いた分子動力学シミュレーションを行うことで、生体膜における生体分子のダイナミクスについて分子レベルで研究してきた。シミュレーションから得られた一分子の時系列データを解析することで、脂質膜の粘弾性特性から生じる膜内における脂質分子の側方方向の異常拡散現象 [1]や脂質分子の垂直方向の移動現象（フリップ・フロップ現象）[2]を明らかにしてきた。これら、脂質膜における生体分子の拡散には、脂質-脂質、タンパク質-脂質相互作用が原子、分子レベルで重要となってくる。膜結合タンパク質と生体膜の相互作用に関しても、タンパク質の特定の脂質分子との相互作用や膜状での配向などが分子レベルで解析でき [3]、一分子測定実験や生化学実験との比較が可能となる。

さらに、生体膜上の分子ダイナミクスに関して、水分子は、脂質膜の粘弾性的なふるまいと脂質膜表面へのトラップ効果から異常拡散を示す [4]。一方、タンパク質など分子の種類や大きさが変われば生体膜との相互作用も変化し、水分子とは違ったダイナミクスが観測される。特定の脂質分子がタンパク質周りでクラスター化することによって、膜上でのタンパク質の拡散性がゆるぐ不均一拡散現象を示す[5, 6]。

参考文献

- [1] T. Akimoto, E. Yamamoto, K. Yasuoka, Y. Hirano, and M. Yasui, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 178103 (2011).
- [2] N. Arai, T. Akimoto, E. Yamamoto, M. Yasui, and K. Yasuoka, *J. Chem. Phys.* **140**, 064901 (2014),
- [3] E. Yamamoto, A. C. Kalli, K. Yasuoka, and M. S. P. Sansom, *Structure* **24**, 1421 (2016).
- [4] E. Yamamoto, T. Akimoto, M. Yasui, and K. Yasuoka, *Sci. Rep.* **4**, 4720 (2014).
- [5] E. Yamamoto, A. C. Kalli, T. Akimoto, K. Yasuoka, and M. S. P. Sanso, *Sci. Rep.* **5**, 18245 (2015).
- [6] E. Yamamoto, T. Akimoto, A. C. Kalli, K. Yasuoka, and M. S. P. Sansom, *Science Adv.* **3**, e1601871 (2017).