

膜貫通コイルドコイルペプチドチャネルの *de novo* 設計

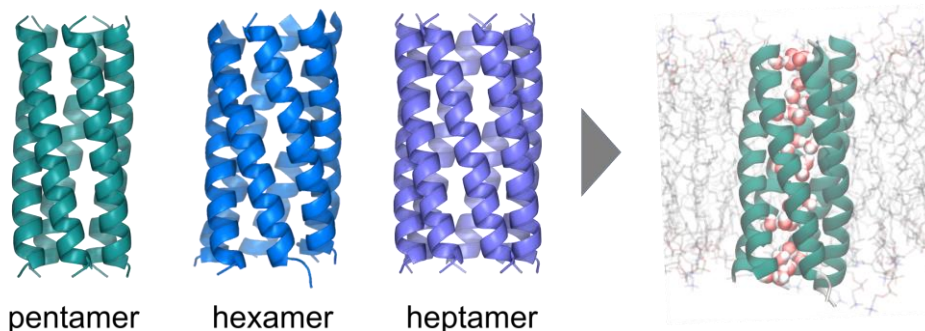
(理化学研究所¹、ブリストル大²、ロンドン大キングスカレッジ³、オックスフォード大⁴) ○新津 藍¹、Andrew Thomson²、Alistair Scott²、Jason Sengel³、杉田 有治¹、Mark Wallace³、Hagan Bayley⁴、Derek Woolfson²

De novo design of transmembrane coiled-coil peptide channels ○Ai Niitsu¹, Andrew R Thomson², Alistair J Scott², Jason T Sengel³, Yuji Sugita¹, Mark I Wallace³, Hagan Bayley⁴, Derek N Woolfson² (¹Riken, ²Univ. of Bristol, ³KCL, ⁴Univ. of Oxford)

De novo design of membrane proteins requires deep understandings of their sequence-to-structure relationship¹⁾. To address this challenge, focusing on coiled-coil structures based on stable helix-helix packing, we rationally design and synthesize transmembrane coiled-coil peptide-based ion channels. Through computational peptide design and structure prediction along with experimental structural analysis and single channel current recording of the designed peptide channels, we shed light on general principles of coiled-coil formation in membrane.

Keywords : *Transmembrane Peptide, Protein Design, Single Channel Recording, Molecular Dynamics*

膜タンパク質の *de novo* 設計を達成するためには、膜タンパク質のアミノ酸配列-構造相関を理解することが不可欠である¹⁾。そこで本研究では、安定な α -ヘリックス会合構造として知られるコイルドコイル構造に着目し、イオンチャネルを形成するコイルドコイルペプチドを設計・合成した。計算機を用いたペプチド理論設計と構造予測、およびペプチド会合体の構造分析、一分子チャネル電流測定より得られた、膜貫通コイルドコイル構造の形成機序について報告する。



1) Membrane-spanning α -helical barrels as tractable protein-design targets. A. Niitsu, J.W. Heal, K. Fauland, A.R. Thomson, D.N. Woolfson, *Phil. Trans. R. Soc. B* **2017**, 372, 20160213