細胞膜内における活性酸素種輸送の分子動力学解析
- アンブレラサンプリングにおけるウィンドウ幅の影響 -

Molecular dynamics analysis of reactive oxygen species transport in cell membranes
- Influence of window width on umbrella sampling -

首都大理工，○太田隼人，内田 諭，栃久保 文嘉

Tokyo Metro. Univ., ○H. Ohta, S. Uchida, F. Tochikubo

E-mail: ohta-hayato@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、プラズマ医科学が急速に発展し、有益な医療効果が確認されている[1]。本現象はプラズマ照射時に生成されるラジカルやイオンに起因することが実験的に示されている。具体的には、細胞や組織表面での機能発現、細胞膜への浸透、さらには細胞内の化学反応を引き起こす。

しかしながら、プラズマより生じる放電活性種と生体分子との相互作用は、十分には理解されていない。特に分子レベルの複雑な生体応答は実験的な定量化が困難であり、数値シミュレーションによるモデル解析が不可欠である。実際、活性酸素種の膜輸送を再現した分子シミュレーションが行われている[2]。

本研究の目的は、拡張性の高い全原子モデルを用いた放電活性種における膜透過基礎特性の精査である。本報では、水中膜モデルにおける酸素活性種の平均力ポテンシャル(potential of mean force 以下 PMF) をアンブレラサンプリング法により導出した。また、サンプリングウィンドウを増加した場合における PMF の安定性および再現性を検証した。

2. 解析方法

本解析モデルは、細胞膜を構成するリン脂質として 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glyoero-3-phosphocholine (POPC)を選択し、128 の POPC 分子と 3812 の水分子で構築した。アンブレラサンプリングのウィンドウ幅を 1 Å として計算を行った。平衡時間は 3 ns とし、その他の条件は前報[3]と同様とした。

3. 解析結果および考察

Fig. 1 に OH における PMF の膜内位置依存性を示す。比較のため、膜中心（0 Å）から 2 Å 刻み（even）および 1 Å の位置から 2 Å 刻み（odd）の結果も付記している。

ウィンドウ幅が 2 Å の場合と比べて、ウィンドウ幅が 1 Å では特性曲線が平滑化されている。Fig. 2 および Fig. 3 に示す OH のヒストグラムを比較すると、重なりに差があるのが明白である。すなわち、標本量が増加したため、統計誤差が減少したと言える。

また、ウィンドウ幅が 1 Å における PMF は、他 2 つの条件における結果を平均化したような特性となった。

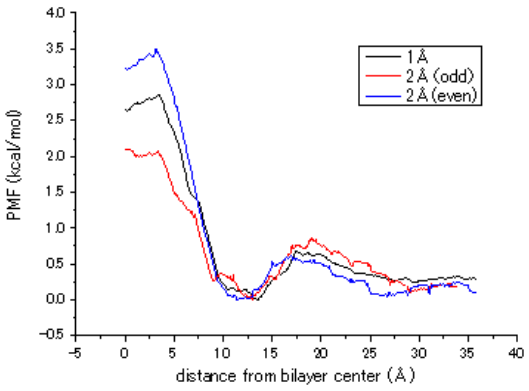


Fig. 1. Dependence of PMF on position in membrane

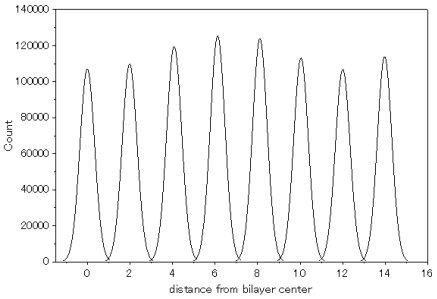


Fig. 2. Histogram of OH at 2 Å（even）intervals

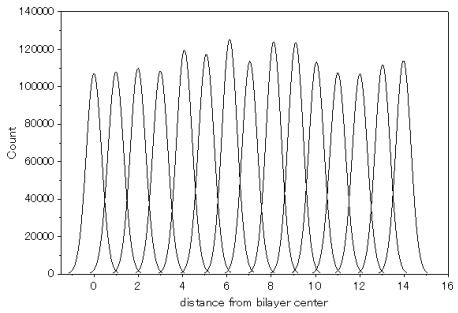


Fig. 3. Histogram of OH at 1 Å intervals

文献

(1) Th.von Woedtke *et al.*, Physics Reports. **530**,291-320 (2013)
(2) A.Bogaerts *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 054002 (2016)
(3) 太田隼人他 第 65 回応用物理学会 19p-C201-8 (2018)
(4) M.Yuspov *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**, 125401 (2018)
(5) R. M. Cordeiro, Biochim. Biophys. Acta. **1838**, 438–444 (2014)

© 2019年 応用物理学会