

演 題	Cs イオンのグラミシジンAイオンチャネル透過のMDシミュレーション	
発 表 者 ( 所 属 )	○ 小野澤晃, 中島俊男* (大分大工, *大分大教育)	
連 絡 先	〒870-1192 大分市 且野原 700 大分大学 教育福祉科学部	
キ ー ワ ー ド	グラミシジン A, イオンチャネル, MD シミュレーション, namd ,VMD	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	POPE 脂質二分子膜中のグラミシジン A イオンチャネルによる陽イオンの透過の MD シミュレーション法を確立し,構造のビジュアル化,統計量,微視的エネルギーの計算を可能にすることによって,他の膜システムのシミュレーションによる研究を容易にすることが期待される。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V (AT 互換機) ,ワークステーション
	O S 名	Redhat Linux8.0
	ソ ー ス 言 語	C
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス, 出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

## 1. 緒言

近年脂質二分子膜中のグラミシジン A の透過の MD シミュレーションはいくつかの研究グループで行われている。われわれは POPE 脂質二分子膜中のグラミシジン A イオンチャネルによるセシウムイオンの透過性の様子をビジュアル的に観察するのを目的に namd を使用して計算を行った。今回はセシウムイオンが透過する際に水分子がどのような挙動をするのか, またグラミシジン近傍でカウンターイオンの塩素イオンがどのような役割をするのかに注目した。

## 2. 方法

グラミシジンの初期配置はイオンが透過するようなポリペプチドが重なった構造から出発した。モデルの構築はVMDを使って行った。POPE脂質8個をグラミシジンの周りにZ軸に平行に配置させCs<sup>+</sup>イオン4個,Cl<sup>-</sup>イオン4個をそれぞれの膜内外に配置した。またZ軸の両端に水をそれぞれ290個ずつ配置させた。セルの大きさは64×32×32 Å<sup>3</sup>で,温度は310Kに設定した。2個のCsイオンのみに外力を5 kcal/mol・Åかけ,2.5 nsのシミュレーションを行なった。二分子膜のシミュレーションは,周期境界条件下,NVTアンサンブルで行なった。MD計算には,namdを使用した。

### 3. 結果と考察

図1,図2にそれぞれ時間の関数とした温度,エネルギーのモニター曲線を示す。50ps以内に一定に達した。二分子膜のシミュレーションのスナップ・ショットを図3に示した。水分子がグラミシジン中にCsイオンとともに透過していく様子がわかる。図4から明らかなように平均して250psおきにCsイオンが透過していった。あるCsイオンは約0.3nsでグラミシジン中を通過した(図5)。グラミシジンAは二つのらせん状のポリペプチドがちょうど重なったとき,イオンが透過できるが,2分子のグラミシジンの境界領域でイオンの透過速度がもっとも小さくなる結果を得た(図6)。今後グラミシジン内でのセシウムイオンの透過速度とD体,L体を含めた構成アミノ酸の種類との相関関係をエネルギー的に明らかにする予定である。

### 4. 参考文献

Roux, B. and M. Karplus. 1994. Molecular dynamics simulations of the gramicidin channel.

*Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 23:731-761.

### 5. 参考サイト

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

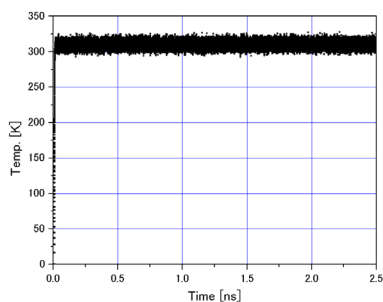


図1

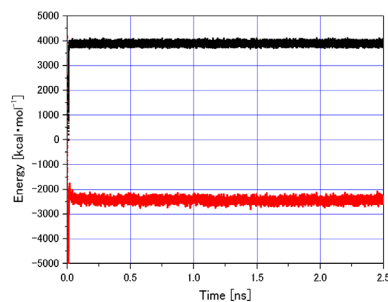


図2

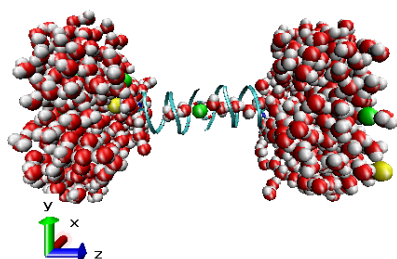


図3

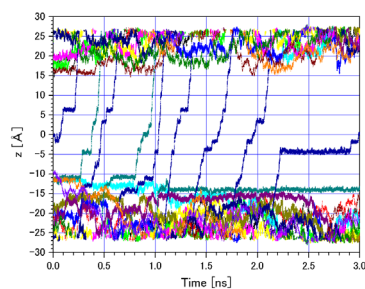


図4

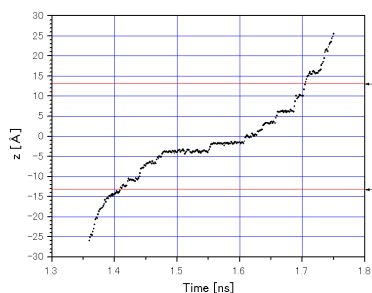


図5

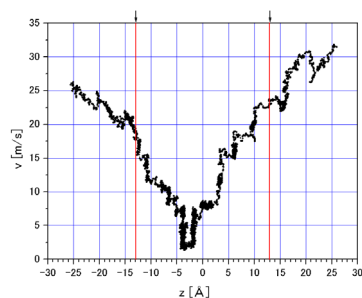


図6