

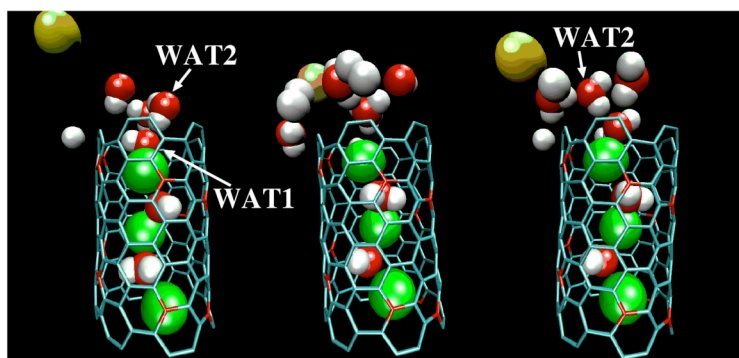
モデルチャネルにおけるイオン透過機構；アニオンを付加したカーボンナノチューブ
 における K^+ イオンのダイナミクスとイオン透過に関する自由エネルギー面

名古屋大理工¹・分子研² ○炭竈 享司¹・斉藤 真司²・大峰 巖¹

sumi@chem.nagoya-u.ac.jp

イオンチャネルとは、膜電位に駆動されたイオンの受動輸送により、神経伝達などの役割を果たす膜タンパク質である。1998年に K^+ チャネルの X線構造解析がなされて以来¹、さまざまな理論的研究がなされてきたが、イオンの透過過程については未だ十分な理解が得られていない。そこで我々は、 K^+ チャネルをカーボンナノチューブに負電荷を付加したモデルチャネルで模倣することにより、モデルチャネルにおける K^+ イオンの透過を分子動力学法によるシミュレーションで計算することに成功し、 K^+ イオンの透過に関して、ダイナミクス・自由エネルギー面を解析した²。

その結果、イオン透過の律速段階はイオンがどのようにチャネルに入るかであることを明らかにした。イオンのチャネルへの侵入は、チャネルの入口に存在する水分子(WAT2)により阻まれており、実際、チャネル入口へ到達したイオンのうち、わ



ずか約 10% が透過することができた。透過することができるイオンの割合はチャネル入口近傍の水分子の位置に敏感であり、その位置はナノチューブ上の電荷の大きさに容易に調節できることが分かった。例えば、本研究のモデルチャネルにおいては、ナノチューブ上の負電荷が $-5.4e$ の時に最大チャネルコンダクタンスを有する。また、この電荷においては、チャネル内のイオンの個数の揺らぎがチャネル内におけるイオンの移動を容易にしていることも分かった。したがって、本研究のモデルチャネルにおけるイオン透過機構は、イオン間反発により近づいてきたイオンがチャネル内のイオンを弾き出すモデル、いわゆる生体系のチャネルで言われる「ロックオン機構」とは異なることが分かった。

我々は、イオン透過における遷移状態の構造も求めており、その構造は、次にチャネルに入る近づいてきたイオン、WAT1、WAT2 が正三角形を成している時であることが分かった。さらに現在、イオン透過に関するエネルギー面、エントロピー面も計算中であり、まだ十分な精度ではないが、イオン-水の相互作用により、チャネル入口近傍にエネルギー障壁が出来ることが分かった。これは遷移状態における構造はエネルギー的に不利であり、それによりエネルギー、さらには自由エネルギーに障壁が出来ることを示している。詳細な解析は当日示す予定である。

1. Doyle, D. A., Cabral, J. M., Pfuetzber, R. A., et al., *Science* **280**, 69 (1998).
2. Sumikama, T., Saito, S., and Ohmine, I. *J. Phys. Chem. B* **110**, 20671 (2006).