

脂質2重膜中のアクアポリン1(4量体) の水透過シミュレーション

■ 開発者

- 橋戸公則、池口満徳、木寺詔紀（横浜市大）

■ 概要

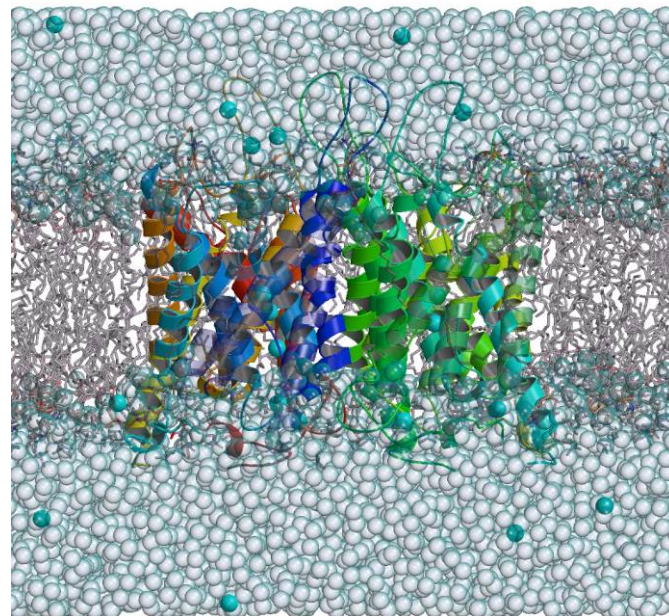
- アクアポリンは細胞の水分調節をする膜タンパク質であり、Peter Agreの2003年のノーベル化学賞の受賞によって著名である。ここでは、脂質2重膜中にアクアポリン1(4量体)を埋め込み、チャンネル内の水透過をシミュレートしている。チャンネル内の水透過は、停留位置間をジャンプする拡散過程として記述することができ、その拡散定数は実験値を再現している。

■ アルゴリズム

- プログラム: Marble (部分剛体法)
- 力場: CHARMM、TIP3P
- NPT
- PME

■ 計算規模

- 150,000 原子
- 5ns



■ どのようなことが期待されるか？

- 水透過とチャンネル部分の原子レベルの構造との相関を明らかにした。
- 水透過は、大きく摂動を受けたsingle-file輸送であり、single-fileの強弱が大きく透過速度に関わる