

## 29【P1】 I -139

Mg<sup>2+</sup>イオンと生体膜との相互作用の分子動力学シミュレーションによる解明

○森 健一<sup>1</sup>, 畑 晶之<sup>1</sup>, 根矢 三郎<sup>1</sup>, 星野 忠次<sup>1</sup>(<sup>1</sup>千葉大院薬)

### 【目的】

Mg<sup>2+</sup>イオンは、細胞内で最も多い 2 価のカチオンであるが、細胞内での分布の詳細は不明である。生体膜は、細胞内基質側に多くの負電荷を持っており、カチオンが凝縮していると考えられる。そこで我々は、生体膜界面での Mg<sup>2+</sup>イオンとリン脂質・コレステロールとの相互作用を調べるため、細胞内イオン濃度・コレステロール濃度・リン脂質の構成比を考慮した生体膜モデルを構築し、分子動力学シミュレーションを行った。

### 【方法】

モデルの構築には VMD、及び AMBER7.0、計算プログラムには NAMD2.5、力場パラメーターは charm22、charmm27 を用いた。細胞膜の細胞外側はフォスファチジルコリン (POPC) で、細胞内側はフォスファチジルエタノールアミン (POPE)、及びフォスファチジルセリン (POPS) を 2 : 1 の成分比で構成した。細胞膜の大きさは 10 nm × 10 nm。イオン濃度は [NaCl] = 150 mM とし、[MgCl<sub>2</sub>] = 10 mM、コレステロール濃度は 33 % とした。

### 【結果および考察】

MD シミュレーションの結果、Mg<sup>2+</sup>イオン-リン脂質間、Mg<sup>2+</sup>イオン-リン脂質-コレステロール間の相互作用が観測された。特に、リン脂質のリン酸基との相互作用が多く観察された。このことから、Mg<sup>2+</sup>イオンと生体膜の相互作用部位は、主に核酸との相互作用と同じ様にリン酸基であるが、一部は、コレステロールのヒドロキシル基や酸性脂質のカルボキシ基であることが分かった。

本研究は、笹川科学研究助成による援助のもとに行われた。