

## 29-0142

分子動力学法を用いた importin- $\beta$  に関する研究

○平野 秀典<sup>1</sup>, 沖本 憲明<sup>1,2</sup>, 末永 敦<sup>2</sup>, 二木 紀行<sup>2</sup>, 今本 尚子<sup>3</sup>, 戎崎 俊一<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>理研・計算宇宙, <sup>2</sup>理研・G S C, <sup>3</sup>理研・細胞核機能)

**【目的】**真核細胞は、核膜により核と細胞質が隔てられている。核内で働くタンパク質は細胞質で作られ、核内に輸送される。逆に核内で働きを終えたタンパク質やRNAなどは核から細胞質へ輸送される。このような核-細胞質間の物質の輸送は、核膜に存在する核膜孔を介して行われている。イオンや分子量の小さい分子は核膜孔を自由拡散により通過できる。しかし、分子量の大きい分子は単独で核膜孔を通過できず、輸送担体を介して核の内外へ移動する。輸送担体はそれ自身で核膜孔を通過する能力を持つ。importin- $\beta$ は核膜孔を通過する核タンパク輸送担体で、X線結晶解析により、 $\alpha$ -helix 2本のV字型の繰り返し構造から超らせん構造を作り上げていることが知られている。本研究は、分子動力学(MD)計算により、importin- $\alpha$ の importin- $\beta$  binding (IBB) ドメインを結合した importin- $\beta$ 及び、単独の importin- $\beta$ の水中における構造ダイナミクスを明らかにすることを目的とした。

**【方法】**2種類のモデルを構築するために、importin- $\beta$ に importin- $\alpha$ の IBB ドメインが結合したX線結晶解析構造(PDB entry:1QGK)を用いた。単独の importin- $\beta$ 構造は、このX線結晶解析構造から IBB ドメインを取り除いた。溶媒である水分子は溶質の各原子から最低 18 Åの水層が存在するように TIP3P water を球状に発生させた。構築したモデルの原子数は約13万原子である。力場パラメータはparm96を用い、計算プログラムは分子動力学専用計算機(MDM)用に改良した amber 6を使用した。

**【結果および考察】**構築した2種類のモデルについて、それぞれ 4.0 ns の MD シミュレーションを行った。詳細は当日発表する。