

29-0139

非対称性の生体膜に結合した低分子量 G タンパク質 H-Ras の分子動力学シミュレーション

○森 健一¹, 畑 晶之¹, 根矢 三郎¹, 星野 忠次^{1,2} (¹千葉大院薬,²科技機構さきがけ)

【目的】低分子量 G タンパク質 Ras は生体膜上を運動しているが、その分子レベルでの挙動はあまり分かっていない。本研究は、生体膜に結合した H-Ras の分子動力学シミュレーションを行い、その挙動を明らかにすることを目的とした。

【方法】生体膜モデルとして、POPC/POPE/POPS 混合系に、コレステロールを 22% 含むモデルと含まないモデルを構築した。さらに、[NaCl]=0.15M としてイオンを発生させ、GDP 結合型 H-Ras に C 末端とファルネシル基を補ったものを加え、ファルネシル基に一定の力を加えながら膜に挿入した。計算プログラムは NAMD 2.7、生体膜の構築には、本研究室で開発中の MMT (Membrane Modeling Tool) を用いた。

【結果および考察】H-Ras は膜上で 180 度反転するなど大きな運動性を持っていた。これは H-Ras が膜上を高速に運動しているという、1 分子観測などで得られた実験結果を反映している。また、C 末端は膜界面に埋もれていた。本研究の手法は、GTP 型での挙動も研究にも応用できるものと考えられる。

