

シャペロニンに対する蛋白質の挿入ダイナミクス

(九大院理) 原諒平 (神戸大理学研究科) 天野健一
(京都大エネルギー理工学研究所) 木下正弘 (九大院理) 吉森明

【はじめに】

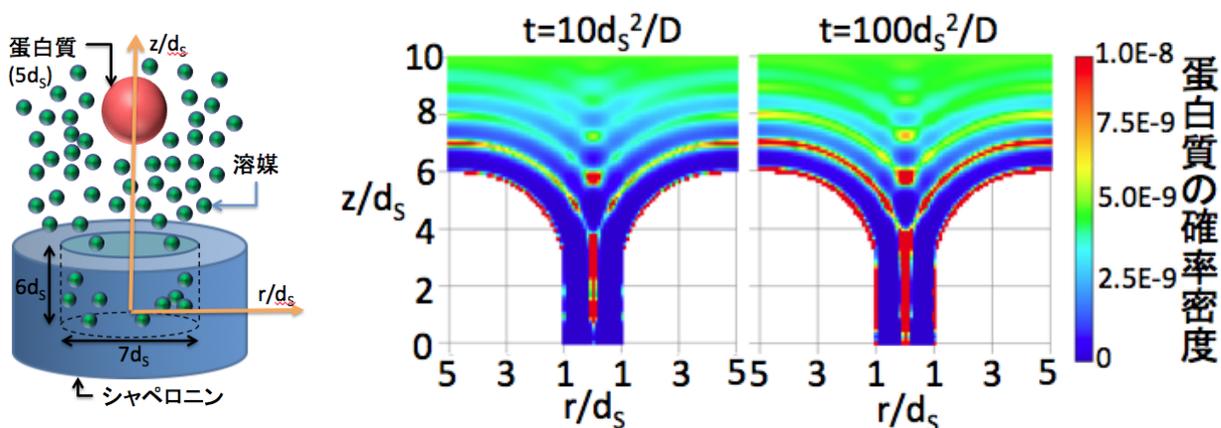
シャペロニンはカゴのような構造をしており、このカゴにフォールディングしていない蛋白質が入ることで蛋白質のフォールディングを助ける機能を持つ。蛋白質がシャペロニンのカゴの中に入るメカニズムは長い間、未解決であった。天野、木下はこのメカニズムを蛋白質がシャペロニンのカゴの外にあるよりもカゴの中にある方が溶媒のエントロピーが大きいことで説明した(1)。本研究ではこのエントロピーの違いを考慮した蛋白質のダイナミクスを計算する理論の確立を目的とする。特に、蛋白質がシャペロニンの底と接触しているときエントロピー最大となるが、実験(2)では蛋白質がシャペロニンの中央にあり、この違いをダイナミクスで解決する。

【方法】

溶媒のエントロピー効果の影響に着目するために蛋白質、溶媒を剛体球、シャペロニンをシリンダー状の剛体とモデル化した(下の左図)。積分方程式理論で溶媒のエントロピー効果による平均力ポテンシャルを計算し、このポテンシャルを用いてフォッカープランク方程式で蛋白質の確率密度分布の時間変化を計算した。

【結果と考察】

蛋白質の確率密度分布の時間変化から、蛋白質がシャペロニンの中に入る様子を明らかにした。蛋白質は一度実験で見つかった位置 (シャペロニンの中央) にトラップされる。その後($t > 90 ds^2/D$)、シャペロニンの底に到達することが分かった。ここで t は時間、 D は拡散係数、 ds は溶媒の直径である。実験で見つかった位置にいる時間内でシャペロニンは作用していると解釈できる。また、 $t < 50000 ds^2/D$ のときシャペロニンの内側から蛋白質が流入することを明らかにした。



【参考文献】

- (1) K. Amano et al., *Chemical Physics Letters*, **488**, 1-6 (2010).
- (2) R. Kanno et al., *Structure* **17**, 287-293, February 13, 2009.