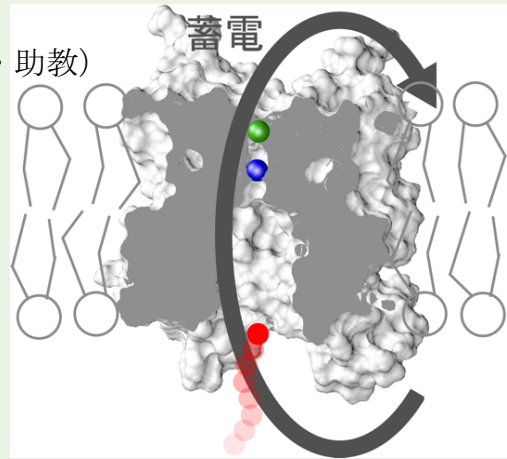


## 分布関数の時間発展で生体内現象を解析する：

### K<sup>+</sup>チャンネルにおけるイオン透過を例に

講師 炭竈 享司 (福井大学学術研究院医学系部門・助教)  
日時 平成 29 年 6 月 21 日 (水) 16 時 30 分  
場所 自然科学 5 号館 2 講



#### 概要

生命の運動は電気によって制御されており、そのための蓄電装置が生体には備わっている。それはどこにあるのか？どんな分子の働きでこれが可能となっているのか？その鍵となる分子がイオンチャンネルであり、チャンネルを通る電流（イオン透過）によって我々は生命の維持に必要な電位を蓄電している。このように、チャンネルは非常に重要な膜タンパク質であるため、これまでイオン透過について実験的・理論的・計算科学的に広範に調べられてきた。特に、分子動力学 (molecular dynamics; MD) 法を用いたシミュレーションはイオン透過を可視化できる強力な研究手法であり、これはイオン透過研究の 1 つの最前線である。本コロキウムでは、まず生体の活動に必要な電位の発生機構について、次に従来の研究で明らかにされたイオンの透過理論について概説する。

ところで、イオン透過は非平衡な過程である。化学物理的には、話者の不勉強ゆえかもしれないが、未だ非平衡過程の決定的な解析法はないように思われる。それゆえか、従来の研究では非平衡過程であるイオン透過の軌跡から自由エネルギー面を描き、それを解析して透過機構の追求をしている。しかし、本来自由エネルギーは平衡状態にしか成立しない概念であり、従来解析は方法論として論理矛盾していると考える。そこで我々は MD シミュレーションによって得られた透過の軌跡をイオンの分布関数の時間発展として記述する（スモルコフスキー方程式を解くかのように）ことで、透過機構を研究し直した。特に、チャンネル内には複数のイオンが存在しているため、それら複数のイオンの分布関数の時間発展を同時に追跡すれば、どのイオンから動き始めるのか透過の因果（前後？）関係を解明することが出来る。その結果、従来の透過理論を覆す発見をしたのでこれを紹介する。また、本コロキウムで紹介する分布関数の時間発展による記述は、非平衡過程だけでなく平衡状態での運動の解析にも使えるため、現在隆盛している 1 分子生物学等の観察による 1 分子の運動の解析にも容易に適用できる有用な解析法である。

問合せ先 数物科学類 計算科学コース 計算分子科学研究室 三浦 伸一