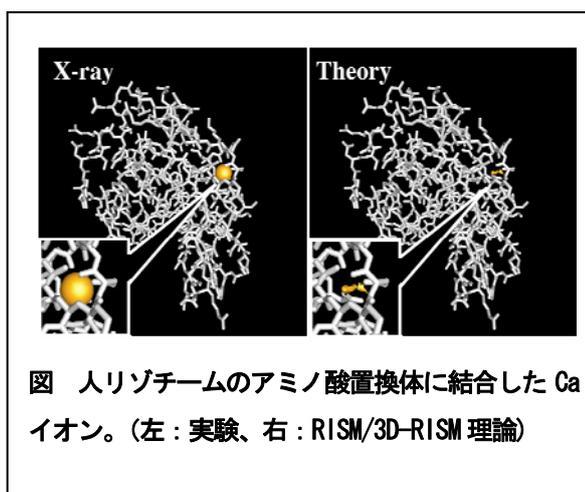


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-6. 生物物理化学
小項目	3-6-9. チャネルによるイオン透過機構の理論

概要（200字以内）

イオンチャネルは生物内の情報伝達機構において中心的な役割を担う分子機械である。その透過機構は次の3つの要素から成り立っている。分子（イオン）認識過程、(2)チャネル蛋白質の構造揺らぎ、(3)イオン伝導過程。最近、液体の統計力学の方法（RISM/3D-RISM）に基づき、それぞれの過程を記述する方法論が出来つつある。本稿では、その研究の現状と展望について述べる。



現状と最前線

イオンチャネルは生物内の情報伝達機構において中心的な役割を担う分子機械である。イオンチャネルの作動機構を物理化学の視点から見た場合、それは(1)分子（イオン）認識過程、(2)チャネル蛋白質の構造揺らぎ、(3)イオン伝導過程、という三つの要素過程から成り立っており、それらの要素過程が互いに複雑に相関し合ってイオン透過を制御している。

イオンチャネルに関連した問題で、最近、大きな進展があった。それは統計力学の方法（RISM/3D-RISM）により蛋白質内部の空孔に結合した水やイオンの3次元分布が得られたことである。(図) この結果は「分子認識」の問題が統計力学によって本質的に解決されたことを意味する。[Imai et. al., JACS, 127, 15334 (2005), Yoshida et. al., JACS, 128, 12042 (2006).]

我々は RISM/3D-RISM 理論により、イオンチャネルの作動原理を分子レベルで解明することができると考えている。最初の「分子認識過程」は上に述べたように、電解質水溶液内のチャネル蛋白質の 3D-RISM 計算によって求めることができる。次に、蛋白質および膜の「構造揺らぎ」を再現するためには、RISM/3D-RISM で求めた自由エネルギー曲面上でのランジェヴァンダイナミクスを行う。さらに、チャネル内の「イオン伝導過程」は RISM/3D-RISM と一般化ランジェヴァン方程式（非平衡統計力学）を組み合わせた方法により解決する。

将来予測と方向性
<ul style="list-style-type: none">・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題 細胞膜を除いたチャネル蛋白質だけによるイオンの透過機構の解明 ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題 細胞膜に埋め込まれたチャネル蛋白質によるイオンの透過機構の解明
キーワード
イオンチャネル、透過機構、RISM/3D-RISM、分子認識、構造揺らぎ、イオン伝導

(執筆者： 平田 文男)