

# マイクロドメイン糖脂質の立体配座と分子間相互作用の解析 計算化学からのアプローチ

**キーワード：糖鎖の幾何学構造、ポテンシャルエネルギー、計算化学的手法**

人間文化創成科学研究科自然・応用科学系 専門分野 計算化学 鷹野景子

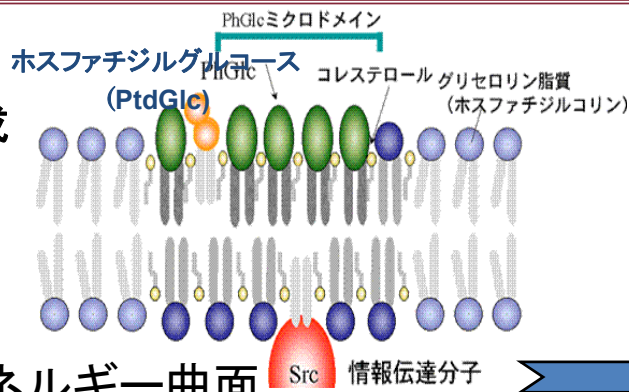
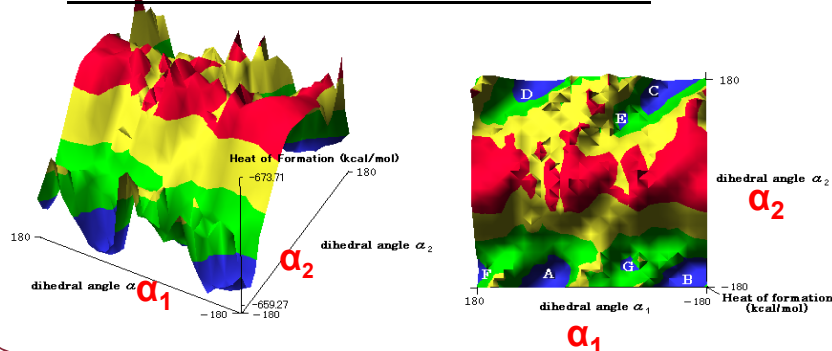
E-mail: takano.keiko@ocha.ac.jp URL: <http://www.ocha.ac.jp/tousa/files/Page453.htm> TEL:5978-5338

細胞膜においてマイクロドメインを形成する新規糖脂質、ホスファチジルグルコースに注目している。ドメイン形成には糖鎖の立体構造が鍵を握っている可能性があるが、実験的にその構造を決定することは困難である。そこで、本研究では、糖鎖の構造を計算化学的手法により解析し、糖脂質分子固有の幾何学構造の特徴を明らかにすることを目的とした。結合まわりの回転によって得られる種々のコンホメーションに対するポテンシャルエネルギーの変化を系統的かつ網羅的に調べた。得られた安定な構造の一例を図に示す。安定なコンホメーションの特徴を調べたところ、ピラノース環が膜平面に対して斜め上方に向き、水酸基の向きが、隣接分子との相互作用に有利な方向となるコンホメーションの比率が高いことがわかった。今後は、2量体モデル系を用いて、分子間相互作用について解析していく予定である。

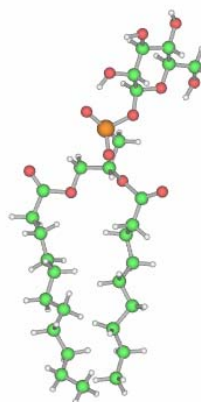
新規糖脂質による  
マイクロドメインの形成

立体構造が鍵？

ポテンシャルエネルギー曲面



**結果：得られた安定な構造の一例**



ピラノース環が斜め  
上方に配向

隣接分子との相互  
作用に、ピラノース  
環の水酸基の向き  
が重要