

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	馬淵 拓哉
研究機関名	東北大学
所属部署名	流体科学研究所
役職名	助教
研究課題名	ナノ空間反応性イオン輸送制御システムの創出
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本年度は、反応性プロトン輸送モデルを用いて、カーボンナノチューブモデル細孔内におけるプロトン輸送現象を解析した。さらに、ナノ細孔内部に種々の極性・非極性分子を修飾させ電荷分布を制御することで、細孔径による選択性だけでなく、イオン種による選択性の機能発現メカニズムを解明した。内部に極性残基を修飾することで、プロトンがオキソニウムとして極性残基と水素結合を形成し、水分子の輸送を抑制することが明らかとなった。さらに、全原子 MD 法を用いて人工 DNA チャネルモデルを構築し、直径約 2nm のナノポアを有する 6 つの螺旋構造からなる six-helix bundle (6HB) を基盤に内部に極性・非極性分子を修飾することで輸送の制御を行った。疎水性の官能基を修飾することで、正電荷イオンの選択性が低下することを明らかにした。

また、粗視化 MD 法による高次構造解析モデルを用いて、相分離構造の制御パラメータに関する知見を応用した人工相分離構造体を構築し、形成メカニズムの解明とイオン濃度の制御に取り組んだ。具体的には、加熱によりドロップレットを形成するエラスチン様ポリペプチド(ELP)に着目し、ELP 配列を人為的に導入した人工相分離タンパク質を設計し、形成能について評価を行った。その結果、ELP 分子量だけでなく ELP 濃度の増加に伴い、相分離形成が促進されることが明らかとなった。さらに、小分子の相分離内への取込評価より、疎水性の小分子のほうが自由エネルギー的にもより安定的に取り込まれることが明らかとなり、ELP 相分離によって疎水的環境場が構築できていることが明らかとなった。