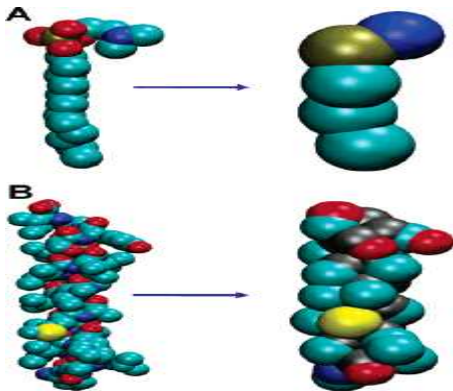


시뮬레이션을 통한 막단백질 삽입 및 조립

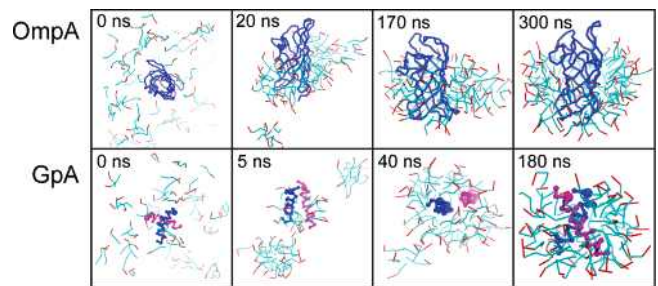
지질들의 상호작용은 막 단백질의 접힘과 안정성의 중심이다. 굽은 입자 분자 역학 시뮬레이션은 두 종류의 막 단백질, 즉 글리코포린(단순 R-나선다발)과 OmpA(α -barrel)의 대표에 대한 단백질/막 및 단백질/세제 복합체의 자체 조립 메커니즘을 밝히기 위해 사용되었다. 굽은 입자 시뮬레이션의 정확도는 단백질/세제 미셀의 자가 조립의 동등한 원자론적 시뮬레이션과 비교하여 확립된다. OmpA/이중층 자가조립의 시뮬레이션은 접힌 외막 단백질이 어떻게 이중층에 삽입될 수 있는지를 보여준다. 글리코포린/이중층 시뮬레이션은 이중층 내에서 이량체 자체 조립보다 막 통과 나선 삽입이 선행하는 막 접힘의 두 가지 상태 모델을 지원한다. 시뮬레이션은 또한 이중층 내에서 글리코포린 나선 단량체와 이량체 사이에 동적 평형이 존재함을 시사한다. 시뮬레이션된 글리코포린 나선 이량체는 NMR에 의해 밝혀진 것과 구조가 매우 가깝다. 따라서, 거친 입도 방법은 막 단백질(제) 접힘 메커니즘을 정의하는 데 도움이 될 수 있으며 생물학적 막의 더 큰 규모의 동적 재배열 시뮬레이션에 적합하다는 것이 입증될 것이다.

키워드

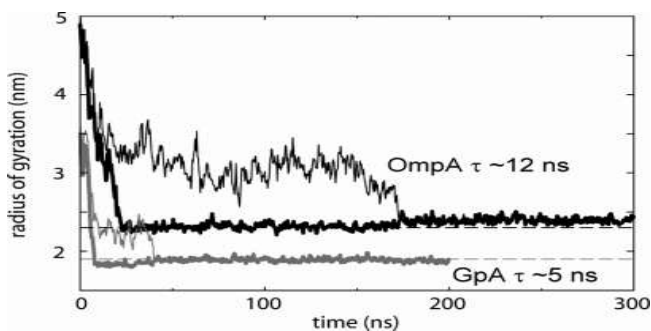
시뮬레이션, 막단백질, 글리코포린, 멤브레인



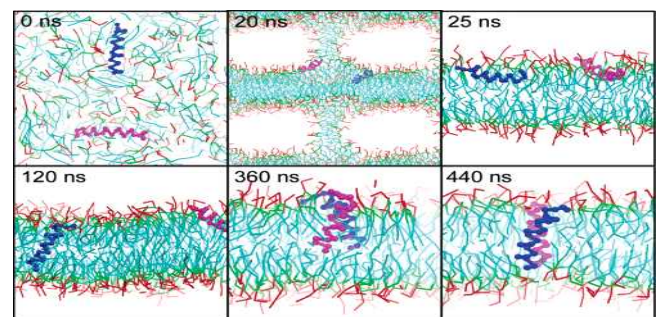
[(A) DPC 분자 및 (B) GpA 나선과 비교한 원자론적(왼쪽) 및 거친(오른쪽) 모델]



[단백질/세제(DPC) 미셀의 자가 조립]



[단백질/세제 미셀로의 OmpA(검은색 라인) 및 GpA(회색 라인) 자가 조립을 위한 세정제 회전 반경]



[지질 이중층에서의 GpA 나선 이량체의 자기 조립]

원 제 목	Insertion and Assembly of Membrane Proteins via Simulation
출 처	JACS Articles
원 저 자	Peter J. Bond, Mark S.P. Sansom