

小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション

名古屋大院工¹、立命館大薬²、微生物化研³、大阪大蛋白研⁴
安藤嘉倫¹、吉井範行¹、山田篤志¹、藤本和士²、小嶋秀和¹
水谷圭佑¹、中川敦史³、野本明男⁴、岡崎 進¹

【MODYLAS】

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS[1]は、京コンピュータにおける超並列計算に対応するために、並列化効率を大幅に低下させる FFT を実質的に回避しながら、周期境界条件下にある分子集合体における長距離力に対して FMM を用いて高精度に計算できるペタフロップス級の MD 計算を実現した汎用プログラムである。京コンピュータ上で行った 65,536 ノード (524,288 コア) を用いた計算では、1,000 万原子系の MD 計算 1 ステップの実行を 5 ms で終える性能を有している。MODYLAS は、自由エネルギー計算をはじめとして分子シミュレーションに関わる様々な機能を備えており、京コンピュータ等を用いたナノ分野、バイオ分野における分子集団系の研究に用いることができる。本ソフトはすでに公開済みである[2]。

【カプシドの構造安定性】

平衡状態において、カプシドはその内外で水分子を交換する。水の移動速度は速い。つまり、約 20 マイクロ秒でカプシド内のすべての水分子を自発的に交換する。このことは、小児マヒウイルスは数千気圧にもものぼる圧力耐性を有する一方で、乾燥に対して容易に不活化するといったことをよく説明している。一方で、電解質は透過させない。つまり、カプシドは浸透膜として機能する。生理的条件下での電解質濃度において浸透圧はさほど高くはなく、カプシドの安定性に影響するほどではない。事実、真水中でウイルスは長時間活性を保つ。

カプシド内外の電解液の状態はさらに興味深い。カプシド内部と外部の電解液の圧力を密度-圧力検量線から評価すると、カプシド内の電解液圧力は負の値を示す。ピリアル定理から求めた圧力も負であり、密度の結果と定量的に良い対応を示した。負圧はバルクにおいては存在し得ないが、小さな空間であるカプシド内は負圧に保たれる。負の圧力は不均一な系、例えば植物の維管束やナノスケールの毛細管において現実に生成されることはよく知られているが、ある一定条件下でウイルスにおいてもそれが見られることは興味深い。負の圧力は熱力学的には不安定であることを意味しており、RNA を収容していない状態でのカプシドの不安定性の原因の一つとなっている。この圧力差によりカプシドは収縮し、これに拮抗する復元力を発生させ力学的釣り合いを保つ。

文献

[1] Y. Andoh et al., *J. Chem. Theory Comp.* **9**, 3201(2013).

[2] <http://www.modylas.org/>