

「分子モーターの1分子計算機実験：エネルギー地形と揺動応答関係の視点から」

オーガナイザー：岡崎 圭一

講師：高野 光則

生命とは生体分子が集まってできたシステムです。その生体分子の中でも分子モーターは、ごく少数（場合によっては1つ）の分子複合体で機能を発揮する自律的なシステムで、熱揺らぎの10倍程度の入力エネルギーを使って高い効率で動作しています。

特にマクロな機械と大きく異なるのは、熱揺らぎをうまく利用して高い効率を実現しているところにあります。つまり分子モーターはマクロな機械のように固いのではなく、その“やわらかさ”をうまく使って動作していると考えられ、その動作メカニズムにとっても関心が持たれて多くの実験がなされ、様々なモデルが提唱されてきました。

今回お話いただく高野先生は、分子シミュレーションの立場からこの分子モーターの動作メカニズムを研究されています。特にアクチン-ミオシン系の動作メカニズムについては、“ブラウニアン・ラチェット”モデルが理論の要になってきたが、アクトミオシンの立体構造および分子間相互作用に立脚したものでないので、実際の実験との間には大きなギャップがあった。そのギャップを埋めていただけたらと思います。

またその他の分子モーターに対しても、タイトルにあるように「エネルギー地形と揺動応答関係の視点から」見たときにきっと新しいメカニズムが見えてくるでしょう。

分子モーターの1分子計算機実験：エネルギー地形と揺動応答関係の視点から

早稲田大学理工学術院 高野 光則

分子モーターの1分子実験からアクチン-ミオシン系や微小管-キネシン/ダイニン系がブラウニアン・モーターとしての性質を持つことが示されている。この講義では、まずキ-となるいくつかの1分子実験結果を概観する。次に、ブラウニアン・モーターの理論の要になってきた”ラチェット機構”を解説する。そして、実験と理論との間のギャップを埋めるものとして、計算機実験による最近の研究を紹介する。特に、ブラウニアン・モーターの動作機構にとって重要と思われる以下の2つの視点に焦点を当てて話を進める。一つは、蛋白質フォールディングの理論研究で中心的な役割を果たしたエネルギー地形（ファネル）の視点である。分子モーターのエネルギー地形がファネルを形成していること（フォールディングファネルに呼応してこれを「機能ファネル」と呼ぶ）を紹介する。もう一つの視点は、熱揺らぎと外からの入力に対する応答を関係づける揺動応答（揺動散逸）関係である。スタティックな揺動応答関係からは分子モーター内部のアロステリックな構造変化を推測することができ、また時間依存的な揺動応答関係からは分子モーター内部に揺動応答関係が破れる「高温状態」が出現することを述べる。最後に、Fo回転分子モーターの計算機実験を紹介し、Fo分子内部に高温と低温の2つの熱源を置いたとき、Fo分子がファインマン・ラチェットさながらにふるまう様子を示す。

