

化学反応による分子モーターの効率

九州大学 理学部 中西 秀,¹ 御手洗 菜美子

Noji らにより F1 モーターの 1 分子測定が行なわれるようになった結果 [1]、ATP の加水分解による分子モーター駆動の微視的メカニズムが具体的に明らかにされつつある。そのダイナミクスを理論的に記述するには、駆動エネルギーがどのような形で供給されたかを含めて、定式化する必要がある。

さて、生体内の分子モーターは ATP の加水分解反応



によって生ずる自由エネルギーの差 ΔG を用いて駆動されている。この自由エネルギー差は、

$$\Delta G = \Delta G^0 - k_B T \ln \frac{[\text{ATP}]}{[\text{ADP}] \cdot [\text{Pi}]}; \quad \Delta G^0 \approx -54 \text{ pN} \cdot \text{nm} \quad (2)$$

と与えられるが、生体内では $\Delta G \approx -100 \text{ pN} \cdot \text{nm}$ 程度である。また、加水分解発熱は $-\Delta H = 30 \text{ pN} \cdot \text{nm}$ である。

F1 モーターでは、木下らの実験により、ATP 1 分子あたり $80 \text{ pN} \cdot \text{nm}$ 程度の出力が測定されている。これは上記 $-\Delta H$ よりかなり大きいので、自由エネルギー入力のかなりの部分が溶質の配位のエントロピーから来ていることがわかる。即ち、F1 モーターでは、加水分解による化学エネルギーと、溶質の配位のエントロピーという、物理的起源の異なる 2 つの部分からなる自由エネルギーを入力として取り入れ、それを仕事という出力に変換している。

本研究では、分子モーターのダイナミクスを記述するのに、エントロピー項とエネルギー項をどのように扱うべきかを議論し、最も簡単な場合に 2 つの項の寄与がどのように現れるかを、具体的計算を行なって示す。

分子モーターの反応サイクルを単純化して、



とする。このサイクルの両端の過程は、空のモーターに ATP と水、あるいは ADP と Pi がとりついたり離脱するプロセスで、最も単純には溶質の濃度の積で与えられるだろう。そこで、真中の部分だけを、モーター（と ATP）の微視的な状態を表す変数の Langevin 方程式でモデル化し、両端の部分は境界条件で表現することによりモデルを定式化しよう。

モーターを表す微視的変数を x として、最も簡単な 1 変数モデルをとり、それに対して Langevin 方程式、

$$\zeta \frac{dx}{dt} = -\phi'(x) + \xi(t), \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t-t') \quad (4)$$

を仮定する。ここで、 $\phi(x)$ はモーターの内部エネルギーのポテンシャルで、 x は有限区間 $[0, L]$ だけを取り、 $x = 0$ が $\text{Motor} \cdot (\text{ATP} \cdot \text{H}_2\text{O})$ に、 $x = L$ が $\text{Motor} \cdot (\text{ADP} \cdot \text{Pi})$ に対応しているとする。

このモデル系を解析する為に、対応する Fokker-Planck 方程式、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J(x,t); \quad J(x,t) \equiv \frac{1}{\zeta} \left(-\phi'(x)P(x,t) - k_B T \frac{\partial}{\partial x} P(x,t) \right) \quad (5)$$

¹ E-mail: naka4scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

の定常解を以下に求める。

分布関数 $P(x, t)$ に対する $x = 0$ および $x = L$ での境界条件は、それぞれモーターが ATP と水、或は ADP と Pi を 1 分子ずつ取り込む頻度に比例しているとするのが自然である。これを、それぞれの分子の溶液中の化学ポテンシャル μ および内部エネルギー ε^0 を用いて、

$$P(0) \propto \exp[\beta(\mu_{\text{ATP}} - \varepsilon_{\text{ATP}}^0)] \cdot \exp[\beta(\mu_{\text{H}_2\text{O}} - \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}^0)] \approx [\text{ATP}] \left(\frac{h^2}{2\pi m_{\text{ATP}} k_B T} \right)^{3/2} e^{s_{\text{H}_2\text{O}}/k_B}$$

$$P(L) \propto \exp[\beta(\mu_{\text{ADP}} - \varepsilon_{\text{ADP}}^0)] \cdot \exp[\beta(\mu_{\text{Pi}} - \varepsilon_{\text{Pi}}^0)] \approx [\text{ADP}] \cdot [\text{Pi}] \left(\frac{h^2}{2\pi m_{\text{Pi}} k_B T} \right)^3$$

と表せるとする。

この境界条件の下で、 $J(x, t) = J_0$ を満たす Fokker-Planck 方程式の定常解は、一般的に書き下すことができる。その結果、定常流束 J_0 は

$$J_0 = \frac{k_B T}{\zeta L^2} \frac{1 - e^{\beta \Delta G}}{C_1 - (1 - e^{\beta \Delta G}) C_2} \quad (6)$$

と表せる。但し、

$$C_1 \equiv \frac{1}{L^2} \int_0^L e^{-\beta \phi(x)} dx \int_0^L e^{\beta \phi(x')} dx', \quad C_2 \equiv \frac{1}{L^2} \int_0^L dx e^{-\beta \phi(x)} \int_0^x e^{\beta \phi(x')} dx', \quad (7)$$

および

$$\Delta G \equiv -\Delta \varepsilon_0 - k_B T \ln \frac{P(0)}{P(L)}; \quad \Delta \varepsilon_0 \equiv \phi(0) - \phi(L) \quad (8)$$

である。

この ΔG は、境界条件の具体的表式を代入することにより、与えられた溶液の濃度と温度の下での ATP + H₂O と ADP + Pi の自由エネルギー差と解釈できる。

実際、この J_0 の表式 (6) は、 $\Delta G < 0$ なら正、 $\Delta G > 0$ なら負を与え、このような定式化で確かにモーターは自由エネルギーが減少する方向に進むので、この意味で (8) 式の ΔG が自由エネルギー差であるとの解釈を正当化できる。

このような分子モーターの定式化は、例えば、溶液も含めた自由エネルギーを Langevin 方程式のポテンシャルとして用いた Wang & Oster による定式化 [2] と、見かけ上かなり異なるように見える。特に、Oster らによる定式化は、内部エネルギーと配位のエントロピーという物理的起源の異なる自由エネルギーを明示的には区別していないが、いくつかのポテンシャルの分岐の相対変位として表現されているように見える。今回の定式化が、Oster らの定式化と本質的に異なる結果を導くのか、あるいは、モデルの各部分の解釈に吸収されるのか、今後検討したい。

参考文献

- [1] H. Noji, R. Yasuda, M. Y. Oshida, and K. Kinosita, *Nature* **386** (1997) 299.
- [2] H. Wang and G. Oster, *Europhysics Lett.* **57** (2002) 134.