

Autonomous free-energy transducers
working under thermal fluctuations

関本 謙

パリ第 7 大学 (フランス)

講演要旨

分子モーターやポンプは、複数の粒子 (化学) 環境間の化学ポテンシャル差が誘起する受動輸送を、分子の能動輸送に共役させている。

分子モーターはその共役に関して自律的である。すなわち、それぞれの内部で熱力学平衡にある部分系以外の外系の助けを借りずに共役させている。自律的な共役系を自律系と呼ぼう。

共役を実現するには 2 次元以上の反応座標が必要である。従来、ある反応の遷移率を他の反応系の状態に依存させるモデル (F1 モーター、ミオシン、2 状態ポテンシャルを有するラチェットなど) がしばしば研究されてきた。

タンパク質構造解析の結果とナノ測定で得られる 1 分子ダイナミクスの知見から構造と機能の相関を知るには、遷移率を変化させる自由度をより明示的に考える必要があるだろう。これが研究の動機である。

対称性の視点からは、共役がどうして起こるかという問いはキュリー原理に帰せられる：詳細釣り合い (時間反転した遷移過程との対称性) や鏡映 (空間反転についての対称性) などを有しない系は、蓋然的には時間反転や空間反転対称性などのない過程を実現する。

制御の視点からは、上の説明は不十分である。共役の結果起こる輸送が能動的な向きである条件も、ましてや 実際の環境の成分濃度のもとで効率良いものである条件も与えられないからだ。

誤動作の少ない共役を行うには駆動側と非駆動側それぞれの内部に誤動作が少なく、かつ両者の過程進行度が (アロステリック) 自由度を介してうまく同期しなければならない。そのためには検出と制御が必要だ。

検出／測定とは系の内部状態を外系の状態に相関させる過程であるが、

揺らぐ世界で、揺らぎを生かしながらも確実性の高い検出を実現するには、立体障害や特異的結合など、 kT より大きなポテンシャルエネルギーとその相殺を関与させ、また粒子の到来を見まがうことはないかわり見逃すことは許容する、といったこの尺度固有の制約があるろう。

誤動作少なく検出と制御を同期させるには、(1) 駆動側の検出を非駆動側の制御に、非駆動側の検出を駆動側の制御に、と2自由度を駆使するか、或は(2) 単一のアロステリック自由度を用いるが、駆動側か非駆動側の一方に律速過程を設けて、他方にはその律速過程の実現を待機させる、という可能性をポテンシャルエネルギーモデルを用いて示した[文献1、2参照]。

エネルギー論の視点からは、環境の濃度差が明確で安定していれば(2)の機構で十分よい効率が得られ、それに比して(1)では大きく変動する環境でも動作が確かなかわり融通性に劣る。一長一短のなかで進化は1自由度/2自由度のいずれを選択してきたのだろうか。立体構造と1分子ダイナミクスのデータを見て回答が得られるだろうか。

展望： 熱は尺度に依存した定義をもつ。タンパク質尺度よりもはるかに小規模の揺らぎは変形自由エネルギーポテンシャル(ほぼ準静的可逆的に熱が出入りする)に算入し、タンパク質規模の揺らぎは、仕事にも熱にも転換しうる、というのがゆらぎのエネルギー論の立場である[3]。異なる尺度の熱およびいわゆる微視的な熱の間のエネルギー授受はどう捉えられるべきかを明らかにしたい。

環境は決して白色マルコフ的な理想化された揺らぎ方はしておらず、むしろ与えられた空間尺度では一定の確率で一定時間は一方向の風が吹く、という描像のほうが現実的だろう。生物的にはタンパク質やそれ以上の空間尺度の揺らぎの特性をどう利しているのか知りたい。

文献2の共同研究者、宗行英朗氏と講演の機会を下さった研究会世話人に特に感謝いたします。

文献

1. Ken Sekimoto, Physica D 205, 242–248 (2005)
2. Eiro Muneyuki & Ken Sekimoto, under revision.
3. 関本謙、ゆらぎのエネルギー論(岩波書店、2004)