3P169

マイクロ粒子輸送機関のミニ格子ガス系モデル

○粟津 暁紀（東大院・理学系・物理）

生体分子機械のような、揺らぎが支配的な世界で何らかの機能を実現する機械には、最低限どのような性質が備わっていて欲しいか？どのような設計が必要で、何ができて何ができないのか？そのような視点から、系のサイズや粒子数の小さい、(空間、状態が離散化された)格子ガス系の実現する運動に着目し、またその運動と分子機械が実現する動作とを比較し、(生体にある、ない、は関係なく)揺らぐ世界で機能する機械の可能な動作論理を探る。今回はイオンポンプのような、(電気化学的に)駆動された粒子の流れによって他の粒子を輸送する、粒子輸送機関をイメージした格子ガス系を考える。具体的には、あるポテンシャル影響下にある短い1次元的な格子ガス系が、2本緩く結合した2レーン格子ガス系を考え、片方のレーンに存在する粒子を外から一方へ駆動した場合の、系の動作に注目する。このような系において、まず比較的単純なポテンシャルの下で見られる、Symporter 的、Antiporter 的輸送と、その外部駆動強度、ポテンシャル強度に依存した輸送方向の選択、またポテンシャル形状と輸送効率の関係、等について議論する。更に流量依存で自律的に開閉するチャンネルの、単純なポテンシャル組合せによる設計、等についても議論する。

Akinori Awazu : Small Lattice Gases Model for Micro Particles Transport Systems

3P171

ミオシンの運動機構の解明に向けて —粗視化モデルによる分子シミュレーション—

○巽 理恵^{1,2}、古賀 信康³、高田 彰二^{1,2,3} (¹神戸大・理、²CREST・JST、³神戸大・院自然)

分子モーターの作動原理を理解することは、分子機械のような自律的で高効率な機械を作るという応用面だけではなく、蛋白質の機能の包括的な理解へとつながる重要な課題である。分子モーターの中で古くから研究されているものの1つがアクトミオシン系である。ミオシンはATPを加水分解することによりアクチン上を運動するが、これまでの構造的見地、1分子ナノテクノロジー等による実験から、2つの運動メカニズムが提案されている。1つは、ATP加水分解に伴ってレバーアームが動くことにより力が発生し運動するとする”レバーアーム説”であり、もう1つは、方向性をもった”ブラウン運動”によるものである。プラス端方向にプロセッシブな運動をする双頭モーターであるミオシンVは、“レバーアーム説”と”ブラウン運動”両方のメカニズムにより運動が生じているのではないかと実験的に推測されている。しかし、今まで、ミオシンの運動過程を直接追ったシミュレーションは限られている。

そこで、我々は、アクトミオシンのような大きな系をも扱える粗視化モデルを用いて、ミオシンVの運動機構の解明を試みた。アクトミオシン系をElastic Network Modelを用いてモデル化し、アクチンとの結合部位である50Kクレフトが閉じレバーアームが下がった”rigor state”とクレフトが開きレバーアームが上がった”transition state”、これら2つの状態間で構造を変化させることにより、ミオシンVの滑り運動をシミュレーションする。詳細な結果については、当日発表する。

R. Tatsumi, N. Koga, and S. Takada : Approach to the mechanical principle of myosin motors using coarse-grained models

3P170

回転分子モーターの理想化モデルの動作特性

○天利 聡、佐々木 一夫（東大院・工学・応物）

化学反応を触媒して力学的仕事をする生物分子モーターの動作原理を理解するためのひとつの方法は、熱機関の研究における Carnot サイクルのような、理想化した単純なモデルを解析することだろう。我々は以前に、そのようなモデルを提案して、(外からの制御によって行う) 準静的過程における化学・力学変換効率などを解析した [K. Sasaki, arXiv:cond-mat/0508037]。この分子化学機関のモデルは F_1 -ATPase を手本にしており、二つの化学的異性体 A と B をもつ仮想的な分子の異性化反応 $A \rightleftharpoons B$ を触媒し、回転軸にトルクをおよぼすことによって力学的仕事をする。

化学機関の構造変化に関わる自由エネルギー関数や、機関と燃料分子との相互作用ポテンシャルをうまく選ぶと、自律的に（外からの制御なしに）動作する回転分子モーターを作ることができる。 F_1 -ATPase は三つの機関 (β サブユニット) を使って回転軸 (γ サブユニット) を回すのに対して、我々の理想化モデルではひとつの機関で回転軸を回すことができる。環境 (粒子源) における分子 A の化学ポテンシャルが分子 B のそれよりも大きいならば、順方向の反応 $A \rightarrow B$ が進行し、モーターは正方向に回転する。強制的に逆方向に回転軸を回してやると、逆反応 $B \rightarrow A$ が起こり、環境の自由エネルギーは増加する。

分子 A の濃度を変えたときの、モーター回転速度の変化は Michaelis-Menten 則にしたがう場合とそうでないことがあることが、数値計算により判明した。Michaelis-Menten 則が成立するための条件 (自由エネルギー関数、相互作用ポテンシャル、A 分子濃度、B 分子濃度など) について解析した結果を報告する。また、順方向および逆方向の運転における化学・力学変換効率についても議論する。

S. Amari and K. Sasaki : Analysis of an idealized model for a rotary molecular motor

3P172

牡蛎のミオシン軽鎖の解離反応の原子間力顕微鏡による直接観察

○谷口 美恵子¹、大西 寛貴¹、矢沢 洋一²、山根 隆¹ (¹名大院*工学部*生物機能工学1、² 北海道教育大2)

軟体動物の筋収縮はミオシンに直接カルシウムが結合することで制御される。ミオシンは2つの重鎖および各2組の制御軽鎖と主要軽鎖から成る。カキのミオシンの制御軽鎖 (RLC) の解離反応を AFM で直接観察した。単分子状態のミオシンを各条件で処理した。RLCs の解離は二価イオンおよび温度に強く左右される。制御軽鎖は EDTA の処理によってミオシンから解離する。MgCl₂ の存在下では軽鎖の解離が少ない (図1)。RLCs の解離に対する温度効果は AFM 画像から各分子をカウントして分析した。解離した RLC/myosin の比率は SDS のゲルの電気泳動像からも計測した。室温で 10 mM EDTA では、RLCs / myosin の比率は 1.91 で完全に解離した。RLC が解離したミオシンへの再結合が MgCl₂ の付加によって行われた。解離された RLC/myosin の比率は 0.51 を示した。私達は軽鎖に結合する Mg 及び Ca イオンの役割を論議する。(a) (b) 図1. (a) 10 mM EDTA 処理 (b) 1 mM MgCl₂ で処理 [1] M. Taniguchi et al: Int. Conf. STM '05 Sapporo, Japan, July 3-8 (2005).

M. Taniguchi, H. Oonishi, Y. Yazawa and T. Yamane : Dissociation of regulatory light chains from oyster myosin observed by atomic force microscopy