

# 生物分子モータ熱揺らぎ動力源説再考

A thermodynamical model of bio-molecular motors using thermal fluctuation

吉田清範

桐蔭横浜大学工学部

(2006年2月28日 受理)

## 1. 生物分子モータの熱揺らぎ動力源説

生物分子モータでのミオシンやキネシン分子の運動のエネルギーは熱エネルギー  $k_B T$  (絶対温度  $T$ , ボルツマン定数  $k_B$ ) 程度なので、分子モータの運動のしくみに熱的揺らぎが本質的に関わっているのではないかと考えられている<sup>(1)</sup>。その一つの説に、分子モータはマクスウエルのデーモンの様に熱的揺らぎを動力源として利用し、ATP等の化学エネルギーはそのデーモンが行う情報処理に使われるのではというものがある。キネシン分子が微小管上を一定方向に動く際に<sup>(2)</sup>、微小管上に8nmおきに“一方通行の弁”があり、弁と弁の間は水分子との衝突によるブラウン運動で動き、ATPの化学エネルギーは弁の作動(情報処理)に使われると考える。但し、“一方通行の弁”はエントロピー増大則に反する<sup>(3)</sup>。

本論文では、“弁の作動(情報処理)”にはエネルギーが不要な事<sup>(4)</sup>、“一方通行の弁”を能動移送チャンネルと解釈すれば、熱揺らぎ動力源説も通常の熱力学の枠内のモデルである事を示す。

## 2. マクスウエルのデーモン再考

2準位系(エネルギー  $\epsilon$ ) 原子の理想気体では、粒子数  $N$ , 体積  $V$ , 圧力  $P$ , エネルギー

換算温度  $T$ , エネルギー  $E$ , エントロピー  $S$ , 基底状態と励起状態の確率  $p_a, p_b$  等に対し、

$$E = (3T/2 + \epsilon) N_b + (3T/2) N_a, \quad PV = NT,$$

$$S = N_a \ln(T^{3/2} V / N_a) + N_b \ln(T^{3/2} V / N_b),$$

$$N_a \equiv N p_a, \quad N_b \equiv N p_b, \quad p_b / p_a = e^{-\epsilon/T}.$$

Stern-Gerlach 装置等で、励起状態  $|b\rangle$  にある分子だけを集め、誘導放出で基底状態  $|a\rangle$  に遷移させてエネルギー  $N_b \epsilon$  を取り出せる。一つの物体だけから仕事を取り出した事になるが、永久機関は存在せず、永久機関サイクルは構築できない。  $\Delta S = 0$  なので取り出した  $\Delta E = N_b \epsilon$  を熱  $T \Delta S$  としては戻せず、得た仕事を費やさざるを得ないからである。実際、仕事を取り出した後の  $|a\rangle$  状態気体  $(N_a, V, T)$  と  $(N_b, V, T)$  を元の状態に戻すには  $(N_a, V p_a, T)$  と  $(N_b, V p_b, T)$  に等温圧縮してエントロピーを下げてから混合する必要がある、圧縮仕事  $W$  は

$$W = N_b \epsilon + N \ln\{1 + \exp(-\epsilon/T)\} \geq N_b \epsilon.$$

マクスウエルのデーモンの用語では、デーモンは熱平衡状態にある物体中の大きいエネルギーを持つ分子を観測選択するのにエネルギーもネゲントロピー(デーモンの記憶の情報量)も要しないが、仕事を取り出した後に熱  $T \Delta S$  として戻せるように物体のエントロピーを  $\Delta S$  だけ減少させるにはエントロピー増大則から  $\Delta S$  だけのデーモンの記憶を要し、得た仕事を記憶の消去<sup>(4)</sup>に費やさざるを得ない。  $\Delta S$  だけ減少させるのに要

する等温圧縮仕事  $T \Delta S$  は熱として移った環境（デーモン）の断熱膨張仕事として賄えるが、環境（デーモン）の増えた  $\Delta S$  を減らすには  $T \Delta S$  の仕事が必要だからである。

しかし、Szilard エンジンのように  $N=1$  の場合は、 $N_a, N_b$  が確率変数となるので、上記の議論は適用できない。物体を観測装置と短時間だけ接触させた後の量子論的波束の収縮<sup>(4)</sup>によってエントロピー  $S_i$  の物理的結果が確率  $p_i$  で生じる場合、観測前の物体のエントロピー  $S$  は

$$S = -\sum p_i (S_i - \ln p_i).$$

波束の収縮が起こって物体のエントロピーが  $S_i$  に減少する時は、デーモンの記憶  $S - S_i$  が物理的に生じると解釈すべきである。

### 3. イオン移送の熱力学

体積  $V$  の溶媒中に電荷  $q$  の  $N$  個のイオンが溶けている時、理想気体と見なしてのエネルギー換算温度  $T$ 、エネルギー  $E$ 、エントロピー  $S$ 、電位  $\phi$  に対し、

$$E = (3T/2 + q\phi)N, S = N \ln(T^{3/2}V/N), PV = NT.$$

イオンチャンネルが1個のイオンを1側から2側に移送する時、温度は同じとして、

$$\Delta E = q(\phi_2 - \phi_1), \Delta S = \ln(c_2/c_1).$$

$$\text{濃度 } c \equiv N/V.$$

イオンチャンネルがする仕事  $R_{ch}$  は、最小仕事の原理より、

$$R_{ch} \geq \Delta E - T \Delta S = q(\phi_2 - \phi_1) + T \ln(c_2/c_1).$$

濃度の濃い方へ能動移送する時、エントロピー増大則より、 $T \Delta S < 0$  の分だけの“圧縮仕事”が必要という事である。

$F_0$  モータ<sup>(5)</sup> が  $H^+$  イオンを能動移送するさいの“圧縮仕事”  $|T \Delta S|$  はモータ自身を加熱するのに使われるが、モータの発電効率は100%とみなせる。可逆的に  $H^+$  イオンの濃度差から回転仕事を取り出す時に熱エネルギーも“膨張仕事”として取り出せるからである。この意味で、 $F_0$  モータも  $|T \Delta S|$  の分は熱揺らぎ（熱運動）を動力源としている。但し、カルノーサイクル（等温膨張、断熱膨

張、等温圧縮、断熱圧縮）に相当する仕組みは未知である（静電ステップモータとしての仕組みさえ未知）。

かかるイオン移送の熱力学は、 $q=0$  として、中性分子の能動移送チャンネルにも適用できる。キネシン分子が微小管上の弁に固着し、ATPの結合で次の弁までブラウン運動で移動するという分子モータ熱揺らぎ動力源説は、等温体積膨張で熱浴から熱を受け取って仕事をし、能動移送チャンネルとしての弁による“圧縮”にATPのエネルギーを用いる熱機関と解釈できる（Szilard エンジンのように  $N=1$  の場合）。

なお、生物分子モータ熱揺らぎ動力源説には“一方通行の弁”を用いないものもある。文献(6)では、ミオシン分子の分子動力学シミュレーションを行って、ATPの結合で各原子の熱運動の位相が揃う傾向にある事を見つけ、この熱振動が猫じゃらしの原理で併進仕事を生み出すと提唱している。熱力学的には、ATPのエネルギーでミオシンのエントロピーを下げて（自由エネルギーを上げて）、環境の熱エネルギーを併進仕事に変換していると解釈できる。能動移送チャンネルの関与しない  $F_1$  モータ<sup>(6)</sup> 等の熱揺らぎ動力源モデルとして有望と思われる。

#### 参考文献

- (1) 上田、石井、柳田：生体ナノ分子機械の分子メカニズム、応用物理、Vol. 71, No. 12, pp. 1457-1466 (2002).
- (2) 吉川雅英：構造から探る生物分子モータ・キネシンのしくみ、日本物理学会誌、Vol. 58, No. 4, pp. 232-238 (2003).
- (3) 吉田清範：ブラウン運動からの仕事の取り出し速度、桐蔭論叢 11, pp. 339-340 (2004).
- (4) 山本喜久：量子物性の物理Ⅱ－量子力学と工学との接点で－、日本物理学会誌、Vol. 60, No. 12, pp. 928-934 (2005).
- (5) W. Junge, H. Lill and S. Engelbrecht: ATP synthase, Trends in Biochem. Sci. 22, No. 11, pp. 420-423 (1997).
- (6) T. Kawakubo, O. Okada, T. Minami: Molecular dynamics simulations of evolved

collective motions of atoms in the myosin motor domain upon perturbation of the ATPase pocket, *Biophys. Chem.* **115**, pp. 77-85 (2005).