

平成27年度 学内研究助成金 研究報告書

研究種目	<input checked="" type="checkbox"/> 奨励研究助成金	<input type="checkbox"/> 研究成果刊行助成金
	<input type="checkbox"/> 21世紀研究開発奨励金 (共同研究助成金)	<input type="checkbox"/> 21世紀教育開発奨励金 (教育推進研究助成金)
研究課題名	疎水バブルを用いたナノサイズモーターの設計	
研究者所属・氏名	研究代表者：理工学部 機械工学科 講師 荒井 規允 共同研究者：	

1. 研究目的・内容

本研究は、分子シミュレーションを用いて生体分子モーターの分子論的なメカニズムを解明し、それを利用した新規ナノモーターシステムを設計することを目指して研究を行った。特にモーター分子が持つ性質が歩行メカニズムに及ぼす影響を調べることで、ナノモーターシステムのエネルギー変換効率に寄与を与えるいくつかのファクターを特定した。

2. 研究経過及び成果

本研究は、申請者のグループが独自に提案した分子モーターの作動メカニズムで、疎水性の板に囲まれた領域における気泡生成現象という非常に基本的な物理現象を利用することで、生体分子モーターの方向性を持った運動を実現している。これまでに、分子シミュレーション法を用い、水中に浸したモーター分子と疎水性の非対称パターンを形成したレール分子の距離を制御することで、相変化によって上記の二つの状態が作れることを見出し、モーターとして機能させることに成功している。本研究では、その新規モーターシステムを発展させ、生体分子モーターのエネルギー効率を上昇させている要因と考えられているが未だに詳細なメカニズムが不明である”**Hand-over-hand 歩行モデル**” (モーター分子内の2つのドメインが交互に前進し、まるで人間が歩くように運動する)の再現を目指し、特にモーター分子自身が持つ性質に着目して研究を行った。

まず、モーター分子には特徴的な構造があると考えた。なぜならば、モーター分子はATPサイクル内でエネルギーを得て、方向性を持った運動を行うが、そのサイクル内でATP状態とADP状態を交互に繰り返すからである。それぞれの状態になりやすい構造が移動とともに自然に作られていると仮定しモータードメイン間に働く分子内力の大きさの検討を行った。その結果、適切な大きさの分子内力を設定したとき、エネルギー変換効率と**Hand-over-hand**で移動(歩行)する割合が最も高くなった。したがって、分子内に働く力もモーター分子の歩行に影響を与えるファクターの1つであると示すことができた。

次に、ATPサイクル内におけるモーター分子の結晶構造を調べた実験結果を踏まえ、モータードメインの状態の移り変わりのスイッチを、レール分子のパターンに関する距離の関数としてモデル化を行った。その結果、**Hand-over-hand**歩行の割合は飛躍的に向上し、従来のモーターシステムに比べて、高いエネルギー変換効率を得ることができた。

我々の提案したナノモーターシステムは、生体機能の解明という理学的な興味からも、バイオミメティクスによる高効率モーターの作成という工学的な興味からも重要な研究であると考えている。そして、本研究で得られた結果は、将来のナノサイズモーターシステム的设计に対し、多大な知見を与えることができると期待している。

3. 本研究と関連した今後の研究計画

Hand-over-hand 歩行モデルと同様に、モーター分子の”協調的運動”(複数のモーター分子が集合し、連携を取り合う)もまた、モーター分子の高いエネルギー変換効率を実現している要因の一つであると考えられている。本研究で明らかになった、適切な分子内力とスイッチングモデルを利用し、複数の分子モーターをシミュレーションで再現することで、協調的運動の分子論的な起源を探ることを検討している。また、分子の化学的な特徴を取り入れた分子シミュレーションによって、ナノモーターシステムのより詳細な設計を目指すことも考えている。

4. 成果の発表等

発表機関名	種類(著書・雑誌・口頭)	発表年月日(予定を含む)
分子シミュレーション討論会	口頭発表	2015年12月1日
International Congress on Rheology	口頭発表	2016年8月8日
Journal of Chemical Physics	雑誌	2016年中を予定(投稿済)