

【領域番号】 4001

【領域略称名】 水とATP

【領域代表者（所属）】 鈴木 誠（東北大学・大学院工学研究科・教授）

これまでに得られた主な成果として、(1) 理論検証、理論モデル構築に必要な ATP、ADP、Pi の水和状態を実験的に明らかにできた。これまで構造の複雑さゆえに理論的評価が困難であった反応物 (ATP) および生成物 (ADP、Pi) の水和自由エネルギーについて、最近の分子構造論に新たに構築したエネルギー表示溶液理論と溶媒 (水) との相互作用による電子密度ゆらぎを含む量子計算を組み込み、現在世界最高精度の全原子モデルを用いた計算が可能になった。その結果、“ATP エネルギー” における分子内効果と水和効果が拮抗することなど、“ATP エネルギー” の物理的起源をほぼ解明できた。(2) ATP 駆動タンパク質の機能における水の役割に関しては、ATP 加水分解反応に共役したタンパク質分子間複合体の構造変化に対応して、溶媒である水側の誘電緩和応答や拡散係数等の変化を実験的にとらえ、理論的に水側のエントロピー変化を評価することで、アクチン運動のポテンシャル場を形成する定量的物理モデルを提案した。1 分子実験によるすべり運動の揺らぎや F1 モーターの回転揺らぎなど実験分子機能解析も進み、アクチン等分子モーター機能を水和現象も取り入れた熱力学で議論が可能になってきた。