

## 自己評価報告書

平成23年 4月 5日現在

機関番号：11301

研究種目：新学術領域研究

研究期間：2008～2012

課題番号：20118001

研究課題名（和文） ATPエネルギーの総括研究

研究課題名（英文） Research integration on ATP energy

研究代表者

鈴木 誠 (SUZUKI MAKOTO)

東北大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：60282109

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・生物物理・化学物理

キーワード：ATPエネルギー、水和、水のエントロピー、加水分解自由エネルギー

## 1. 研究計画の概要

ATP（アデノシン三リン酸）は生命系のエネルギーの供給と需要の媒体であるが、その有効性の真の理解、すなわち、化学-力学エネルギー変換の分子論は未確立である。本領域は、物質科学と生命科学の両方にまたがる根本課題に取り組む。生命系存続の環境母体である「水」を主役とし、構造論・機能論に立脚した新しいエネルギー論の分子的基盤構築を目指し、既存の概念にとらわれない学際的研究領域を新たに開拓する。このためには、異なる分野の「融合」による新たな方法論の展開と次世代育成が不可欠である。計画研究のほかに幅広い分野からのユニークな公募研究を糾合して、理論的研究と実験的研究とを緊密に組織化して推進している。

基本的な研究戦略：第1に実験と理論でATP等低分子の化学反応前後の物質の水和自由エネルギーを正確に求める。その計算に必要な新たな手法の開発も含む。第2にヌクレオチドと種々のタンパク質の結合の自由エネルギーの内部構成を実験と理論両面から調べる。第3にヌクレオチド加水分解酵素の機能について、水和を含めたエネルギー論の観点で実施する研究を行う。

## 2. 研究の進捗状況

総括班では、研究領域の研究全体の推進、企画調整、自己評価、研究支援活動等を行う。前期に引き続き「ATPのエネルギーとは何か？」この解明のために現時点で組織できるベストの研究者で計画研究を組織した。計画研究でカバーできない重要課題、斬新な課題あるいは地味でも重要な測定等に取り組む公募研究を募り、有効な情報交流の場の提供を通じて、問題解決に効率的に取り組めるよう運営に努めている。また随時開催する研究

会と、計画を機動的に調整しつつ、公開シンポジウム、国際シンポジウム、Web (<http://www.material.tohoku.ac.jp/atpwater/index.htm>)を通じて成果を公開発信し、目標実現に向けて推進している。領域研究の目標に向けた推進、とくにメンバー間の共同研究を推進し、個々の力以上の相乗効果の実現を図った。また、外部委員を含めた自己評価により、領域研究の多面的活動について評価を行い、プログラム後期の企画運営に活かしていく。

## 3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

（理由）

計画研究の理論グループでは、エネルギー表示法による自由エネルギー解析によって、水和効果・溶媒効果の原子レベル解析を高速に行うことができるようになった。実験グループは、共溶媒効果や高塩濃度極端条件を統合的に調べることを可能としており、理論定量的解析との連携を更に強力に推進している。理論グループでの水和エントロピー解析の進展により、ATP駆動タンパク質の周りの有効ポテンシャル場が計算可能になり、一見連携が難しいA03班の理論基盤も保証されつつある。この成果はJ.Chem.Phys.の注目論文として選定され、JACSではF1モーターの駆動を説明した。ハイパーモバイル水を中心とするマイクロ水和解析では、観測量を局所応答量の時空間積分で表現する水和殻表式を開発したことで、構造⇄ダイナミクス⇄エネルギー論の相互関係を、理論・実験の相補的運用で解明の道筋が見えてきた。

## 4. 今後の研究の推進方策

書類審査だけで採択される公募研究の場合、前期の活動状況を基に、領域の目標に向けて

重要な成果を上げつつあるメンバーには予算面でも手厚い形で引き続き採択されることを期待している。

本領域研究は **virtual laboratory** を標榜し、多くの共同研究が展開されている。この中で、有力な **Post Doc** 研究者も育ってきた。旧来の「分野」の枠を取り払った領域構成になっているため、若手研究者にとっては刺激の多い **virtual laboratory** である。若手の自発的交流をサポートするための支援を更に強力にしたい。

前期と同様に、総括班が中心となり、共同研究推進、領域内自己評価と研究支援の中心的役割を担う。前期でもすでに実質的な共同研究から数々の成果がでてきているが、後期でもこの基本路線を維持発展させて進めていく。自己評価は外部有識者も含めて行い、計画の見直しを行う。後半の計画研究の組替えや公募研究採択に反映させる。

#### 5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 95 件)

1. T. Yoshidome, Y. Ito, M. Ikeguchi, M. Kinoshita, Rotation Mechanism of F1-ATPase: Crucial Importance of the Water Entropy Effect, *J. Am. Chem. Soc.* 133, 4030-4039 (2011). 査読有

2. Y. Karino and N. Matubayasi, Hydration property of globular proteins: an analysis of solvation free energy by energy representation method, *J. Chem. Phys.* 134, 041105 (2011). 査読有

3. Y. Karino, M. V. Fedorov, and N. Matubayasi, End-point calculation of solvation free energy of amino-acid analogs by molecular theories of solution, *Chem. Phys. Lett.* 496, 351 (2010) 査読有

4. K. Amano, T. Yoshidome, M. Iwaki, M. Suzuki, M. Kinoshita, Entropic Potential Field Formed for a Linear-Motor Protein near a Filament: Statistical Mechanical Analyses Using Simple Models, *J. Chem. Phys.* 133, 045103 (2010). 査読有

5. G. Mogami, T. Wazawa, N. Morimoto, T. Kodama, M. Suzuki, Hydration properties of adenosine phosphate series as studied by microwave dielectric spectroscopy, *Biophys. Chem.* 154, 1-7 (2010). 査読有

[学会発表] (招待講演 67 件)

1. N. Matubayasi, Free-Energy Analysis of Biomolecular Solvation in the Energetic Perspective, Gordon Research Conference on Water and Aqueous Solutions, Aug. 8-13, 2010, (Holderness, USA)

2. M. Suzuki, Hydration measurement of salt ions, polyelectrolytes, and proteins

in dilute solutions by high resolution dielectric relaxation spectroscopy, TRILATERAL SCIENTIFIC SEMINER ON Solvation in Complex Liquids: Bridging Length Scales by Theory and Experiment, MaxPlanckInstitute, Leipzig, Germany, June 23-25, 2010.

3. M. Sakurai, Brief review and the present understanding of ATP hydrolysis energy, International Symposium on Hydration and ATP Energy, March 8-10, Sendai (2010).

4. M. Suzuki, Dielectric relaxation spectroscopy analysis of hydration of polyelectrolytes and proteins, WORKSHOP SOLVATION OF BIOACTIVE COMPOUNDS, Max Planck Institute, Leipzig, Germany, Jan. 7-9, 2010.

5. M. Kinoshita, Importance of Translational Entropy of Water in Biological Self-Assembly, International Symposium on Multi-Scale Dynamics of Protein Complex Formation and Function, Sanjo Conference Hall, The University of Tokyo, Japan, July 14-16, 2009.

[図書] (計 32 件)

1. H. Takahashi, N. Matubayasi, and M. Nakano, Development of a Quantum Chemical Method Combined with a Theory of Solutions - Free-Energy Calculation for Chemical Reactions by Condensed Phase Simulations, *Advances in Quantum Chemistry*, vol 59, page 283-351 Academic Press, (2010)

2. N. Matubayasi, Free-Energy Analysis of Solvation with the Method of Energy Representation, *Frontiers in Bioscience* 14, 3536-3549, Frontiers in Bioscience, Inc. (2009)

3. M. Kinoshita, "Roles of Translational Motion of Water Molecules in Sustaining Life, *Frontiers in Bioscience* 14, 3419-3454, January 1, 2009, Special Issue, "Theoretical Studies on Roles of Water in Biological Systems", ed. by M. Kinoshita.

[その他] (計 10 件)

1. 木下正弘, PACIFICHEM 2010, Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, New Experimental and Computational Probes of Water in Biological Systems (#130)

2. 鈴木誠, Conference Chair, The 48th Ann. Meeting of the Biophys. Soc. Japan, Sept. 20-22, 仙台 2010.

3. 鈴木誠, 木下正弘, 松林伸幸, 櫻井実, International Symposium on Hydration and ATP Energy, March 8-10, Sendai-Akiu (2010)

4. 松林伸幸, Int. Symposium on Multi-Scale Dynamics of Protein Complex Formation and Function, Tokyo, July 14-16 (2009)