

## 自己評価報告書

平成23年4月28日現在

機関番号：17102

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2008～2012

課題番号：20118007

研究課題名（和文） 溶質分子が作り出す水の状態変化と水からの反作用

研究課題名（英文） Deformation of water originated by a solute molecule and response from water

研究代表者

秋山 良 (AKIYAMA RYO)

九州大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：60363347

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：化学物理、生物物理、液体論、分子認識、多成分系の熱力学

## 1. 研究計画の概要

【平成20年度】水中の溶質分子が感じる静的ポテンシャルのゆらぎの計算を、生体分子の場合でもシミュレーションを通じても確かめ、ATPの加水分解が水の状態に与える影響を調べる。揺らぎの点から荷電符号によって、劇的に水の状態がスイッチする事を調べる。（2年目以降に引き継ぐ。）

【平成21年度以降】前年のものを引き継ぐ。さらに1年目に木下らの溶質周囲の溶媒のエントロピーの計算がスタートしている。そこで、その後を追う形で、分担研究者の吉森と適切な近似の下で一般化ランジュバン方程式を解く事で、二体分布関数と溶質分子のダイナミクスとの関係を定性的に検討し、エネルギー変換機構を議論し、機能発現機構の作業仮説建設につなげたい。（3、4年目）。一方で、積分方程式理論とモデル溶質分子を用いた計算を参照しながら、分子認識機構を議論したい（2、3年目）。

## 2. 研究の進捗状況

## (1) 静的ポテンシャルのゆらぎの計算

分子動力学計算を用いて、上でも触れたスイッチング等に着いて再検討する事が出来た。溶質分子周囲の水と構造変化によってスイッチングだけでなく揺らぎに微細構造が現れる事が示された。さらに外場が強い場合に誘電飽和傾向がある程度進むとその先は線形応答に近接してゆく挙動も示された。また、積分方程式理論の結果の問題点も示されつつある。現在、誘電緩和現象のシミュレーションの準備が進んでいる。また、分子動力学計算だけでなく統計力学理論による溶媒の緩和過程の水和殻解析結果も吉森らによって与えられつつある。

(2) 溶媒中の蛋白質分子の感じる摩擦、および混み合い分子添加効果

平成21年度に静的な場合の混み合い分子の効果、特に活量係数との関係について出版した。溶液中の蛋白質分子の感じる摩擦に着いて計算中である。特に最近添加物効果の進展は大きく、微量でも極めて大きな効果を起こす事が分かりつつある。

## (3) 分子認識機構

ミオグロビンへの麻酔分子の吸着機構の論文を3年目に出版した。溶媒分子の並進運動の重要性は示せたが、この機構は本研究のATPと蛋白質と水の場合にはあまり適切でない事も分かって来た。一方で、分子認識や化学反応（加水分解等）に伴う部分モル体積変化の測定の重要性に着いて解説を執筆した。（掲載は平成23年度になる。）

## (4) 溶媒和変化により駆動されるモーター分子の計算

当初(2)と関連していたが、独立して行っている。ATPの加水分解を意識して、『コロイド粒子表面での化学反応が溶媒和構造変化を引き起こし、その結果コロイド粒子が動く分子モーターモデル』をした。分子動力学計算を用いてその実現可能性を示す事が出来た。

(5) 同符号荷電コロイド粒子間引力の研究  
現在では領域内の研究として行っている。電解質中では同符号荷電コロイド粒子間に実効引力が働く事がある。積分方程式理論を用いて、この実効引力が電解質濃度変化に関してリエントラントな挙動を示す事を再現出来た。この現象はATPを使うアクチンのトレッドミル運動とも関係している事が明らかになりつつある。（これもまたATP加水分解型の分子モーターである）。

### 3. 現在までの達成度

(1) 静的ポテンシャルのゆらぎの計算  
やや遅れている。分子シミュレーションは、率直に言えば2年目の進捗が極めて悪かったため、かなり遅れている。ただし、3年目7月に赴任した博士研究員(久保田陽二氏)の活躍で急速に高い達成度を回復しつつある事は勘案されたい。今月中に論文投稿の予定である。また、研究分担者の吉森の行っている計算の結果がまとまりつつある事も含めると上の評価となる。

(2) 溶媒中の蛋白質分子の感じる摩擦、および混み合い分子添加効果  
当初の計画以上に進展している。関わった学生の卒業等で出版が遅れ気味であるが、現在それらの論文を作成中である。平成23年度中の出版が期待できる。

(3) 分子認識機構  
やや遅れている。本領域の木下、松林らの進捗状況を勘案して、むしろダイナミクス、キネティクス方面に力を入れる事にした。

(4) 溶媒と変化により駆動されるモータ分子の計算

当初の計画以上に進展している。

(5) 同符号荷電コロイド粒子間引力の研究  
当初の計画以上に進展している。以上二つは途中から加わったテーマであるからこのような評価となる。

### 4. 今後の研究の推進方策

(1) 水の中でのポテンシャルゆらぎの計算  
やや遅れているが、3年目7月に赴任した久保田氏の活躍でダイナミクス(誘電緩和現象)研究への準備もできており、平成23年度中には当初の予定に追いつきそうである。今後は主力のテーマとなる。

(2) 溶媒中の蛋白質分子の感じる摩擦、および混み合い分子添加効果

今後の課題は、論文の出版と流体の方程式をどのように考えてゆくかを検討する事にある。また、ハードルは高いが蛋白質形状や水らしさの効果を理論的に取り込んでゆく事も目指したい。

(3) 分子認識機構  
基本的には停止。論文の出版は続ける。木下、松林らの進捗状況を勘案し、領域全体を見てダイナミクス方面に力を入れる事にした。

(4) 溶媒と変化により駆動されるモータ分子の計算

熱揺らぎと同程度の仕事をする系の解析方法を検討する為のモデル系として研究を進めている。アクチン-ミオシン系での解析方法について提案できればと考えている。

(5) 同符号荷電コロイド粒子間引力の研究  
当初の計画以上に進展している。  
論文作成後実体系との関連、実験方法の提案

を検討する予定である。

### 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11件)

①秋山良、青少年のための Asakura-Oosawa 理論入門、生物物理、51, 36-40(2011) 査読有り

②A. Suematsu, A. Yoshimori, T. Odagaki, Studies of liquid-solid transitions using a thermodynamic perturbation method with modified weighted density approximation, Journal of physical Society of Japan, 80, 025001-1-2 (2011) 査読有り

③ A. Yoshimori, Time Dependent Density Functional Theory Formulated by the Interaction-Site model, Journal of physical Society of Japan, 80, 034801-1-8 (2011) 査読有り

④R. Akiyama, Y. Karino, H. Obama, A. Yoshifuku, Adsorption of xenon on a protein arising from the translational motion of solvent molecules, Physical Chemistry and Chemical Physics, 12, 3096-3101 (2010) 査読有り

⑤Y. Karino, R. Akiyama, Effect of Solvent Granularity on the Activity Coefficient of Macromolecules, Chemical Physics Letter, 478, 180-184(2009) 査読有り

[学会発表](計64件)

①R. Akiyama, Attractive interaction between like-charged macromolecules in an electrolyte solution and motion of amoeba, Department Seminar, Virginia Commonwealth University, 2011年3月31日, Richmond, Virginia, USA

②秋山良、電子雲が作る共有結合とイオン雲が作る"共有結合"、九重分光学関連夏季セミナー、2010年7月30日、九州地区九重共同研修所

③秋山良、対イオンがつくる同符号マクロイオン間の"共有結合"とアクチン分子間相互作用: HN C-0Z方程式の解、九州工業大学 情報工学部 生命情報工学科 学科講演会、2009年12月10日、九州工業大学(飯塚)

④秋山良、タンパク質分子間相互作用における水の並進運動効果と熱力学量、生物物理学会第46回年会、2008年12月3日、福岡国際会議場(福岡)

⑤A. Yoshimori, Yamaguchi theory and Van der Waals picture, 2<sup>nd</sup> Mini-Symposium on Liquids 2008年10月3日、九州大学(福岡)

[図書](計0件)

[産業財産権]

○出願状況(計0件)

○取得状況(計0件)

[その他]

なし