

(第3種郵便物認可)

サイ・テラ こころ 知と技の発信

【457】

埼玉大学・理工学研究の現場

ヒトを含む多くの生物の生命現象はタンパク質という紐(ひも)状の分子(原子が集まったもの)によって制御されています。例えば、我々が普段何気なく動かしている筋肉もタンパク質によって動いています。筋細胞に存在するモータータンパク質が一方へ動くことによって筋繊維の伸びや縮みが実現されるのです。また他にも、細胞の表面上にはさまざまな種類のトランスポーターと呼ばれるタンパク質が存在しており、ポンプのように細胞に不要な物質を排出したりします(図参照)。

タンパク質のよつにミクロな世界は我々のサイズの世界とは何が違つてしょうか? ヒトの大きな違いは、常に「揺らいでいる」ということです。ミクロな世界では水分子のサイズが相対的に大きくなり、人間で例えると常にたくさんのテニスボールが衝突してくるので、自然と体が揺らぎます。不思議なのは、上で説明したモータータンパク質やトランスポーターは、そのような厳しい状況で、酔っ払いのよつにふらふら揺らぎながらも一方へ動いたり、物質を排出したりする仕事をこなすことができる点です。そこには、我々のサイズの世界にある機械とは

計算による顕微鏡

松永康佑 准教授

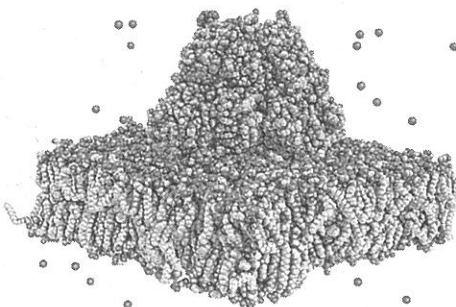


異なつた動作原理があると思われる。タンパク質の揺らぎを観察するための強力な方法として、コンピュータを用いたシミュレーションがあります。分子動力学シミュレーションという方法では、タンパク質の原子を一つ一つ、周りにある水分子も含めてコンピュータの中で再現して、そのバーチャル空間中で原子を動かして揺らぎを観察します。タンパク質1個のシミュレーションでさえも全部でおよそ数十万個もの原子を扱うので、さながら一つの「小宇宙」です。これだけの原子を計算して動かすので、残念ながら、1台のパ

ソコンで十分な揺らぎを観測するには数十年の計算時間がかかつて

しまいます。

そこで、我々はスパコンなどで素早く計算する手法を開発しています。現状では分子モーターの動きシミュレーションで観測することは難しいですが、計算時間が100倍速くなつたら、詳しく観測して動作原理に迫ることができるよう。また、タンパク質へ結合する薬剤の候補物質を今までよりも100倍多く評価できるなどの応用も期待できます。我々が毎日触れているのはパソコンの画面とプログラムのコードですが、今まで見えなかったものを見るための新しい「顕微鏡」を開発している気分です。



まつなが やすひろ 2007年神戸大学大学院自然科学研究科修了。博士(理学)。理化学研究所基礎科学特別研究員、JSTさきがけ研究員などを経て、19年より現職。専門は、生体分子のシミュレーションと機械学習の応用。