

B9 コンピュータの中で生きる細胞を創る!?

ゲノム情報を解析する

展示責任者 富田 勝 / 曾我朋義 / 金井昭夫

展示責任者所属

慶應義塾大学先端生命科学研究所

コンピュータの中で生きる細胞を創るといっても、実際のバクテリアをコンピュータの中で培養しようとしているわけではありません。この研究は、バクテリアの中で行われている様々な化学反応をコンピュータの上に再現していくことで、細胞の代謝のしくみを統合的に理解しようとするものなのです。私たちはこのコンピュータの中で生きる細胞を電子細胞(E-CELL)と呼んでいます。少し前まではそんなに変なことは出来るわけがないと言われていましたが、ここ数年でバクテリアのゲノム(遺伝子全部)の様子が次々と明らかになったことで、出来る可能性が出てきました。

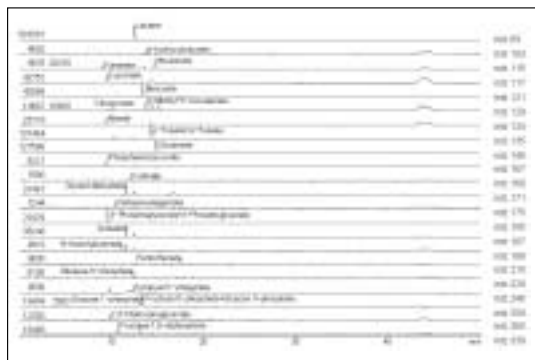
ここで、電子細胞を創るためには、細胞

の中にはどんな化学物質がどのくらいあるのかを知らなければなりません。ところが、このことはほんの部分的にしかわかってないのが実情です。そこで私たちの研究所では、キャピラリー電気泳動質量分析装置(図1)という解析機器



(図1)代謝物質分析装置

を開発し、バクテリアの中の化学物質の種類や量を数多く明らかにしています(図2)。このようなデータを基にしながら、ひとつひとつの化学反応をコンピュータの中に組み込んでいるところです。



(図2)大腸菌の代謝物質解析例

B10 アミノ酸が支配するタンパク質の構造と機能 (新しいシミュレーション技術の開発)

ゲノム情報を解析する

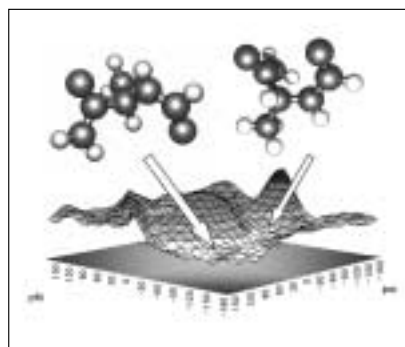
展示責任者 岩岡道夫

展示責任者所属

東海大学理学部化学科

遺伝子に刻まれた生命の情報は、m-RNAを介してタンパク質へと翻訳されます。遺伝情報の産物であるタンパク質は20種類のアミノ酸からなる生体高分子であり、そのアミノ酸配列に従って様々な立体構造をもつことがわかっています。最近では、高速コンピュータを用いた分子シミュレーション(計算)によって、アミノ酸配列(即ち、遺伝情報)からタンパク質の立体構造を予測しようとする研究が盛んに行われています。図1は、量子力学に基づく精度の高い計算によって得られたアラニン分子のポテンシャル曲面を示しています。アラニンは水中ではヘリックス構造やシート構造をとり易いことがわかりました。私たちの研究室では、

このようなポテンシャルを用いて高速かつ高精度でタンパク質立体構造を予測できるシミュレーション技術の開発を進めています。図2は、新しく開発した技術を用いてアラニン10量体の分子シミュレーションを行った結果を示しています。このようなシミュレーション技術は、生命システムの原子レベルからの理解や病気の原因物質の同定、副作用の少ない治療薬の開発などに応用できるものと考えられています。



(図1)アラニン分子のポテンシャル地形と安定構造



(図2)分子シミュレーションによって得られたアラニン10量体の安定構造