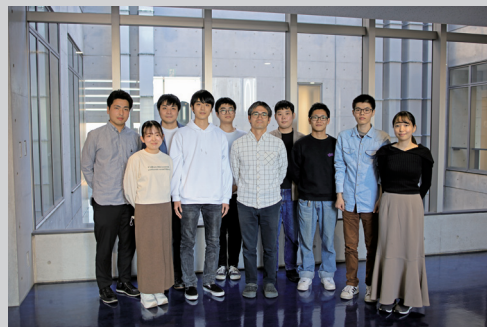




私たちの研究室

安藤 格士 研究室

先進工学部 電子システム工学科 准教授
あんど う ただし
安藤 格士 先生



研究室の学生たちと

とらえどころのない生物の本質を 工学、物理、化学の視点で追う

生命現象の仕組みをその根源に遡って解明することは現在の科学でも難しい。安藤格士先生は生物物理学という研究分野の中でコンピュータシミュレーションやモデリングなどの技術を駆使して、原子や分子のレベルから生物を理解し、その仕組みや生体の制御につながる物質・材料の設計を目指している。

生物の秘密を分子の世界から理解したい

「私の研究の一つに『アミノ酸ホモキラリティー獲得のしくみを理解する』というものがあります。タンパク質はアミノ酸がつながってできたもので、生命活動の主角ともいえるものです。アミノ酸にはL型とD型という鏡の両面のように対称な形のものがあるのですが、生物はなぜかL型のものしか使いません。こ

れをアミノ酸のホモキラリティー【図1】と呼びますが、その起源は生命進化の大きな謎の一つです。私はコンピュータの力を使い、物理、化学の視点からこの謎を明らかにしようと研究を進めています。

実験的な研究により、核酸の一つであるRNAがL型のアミノ酸と反応しやすいということは分かっているのですが、それら分子の動きや反応をコンピュータシミュレーションで再現できるようになれば、その解析データなどからL型だけが使われる理由が具体的に分かってくるのではないかと思います。そういうことを少しずつ解き明かしていくことは、生物学的にも意味があると思うのです」と話す。

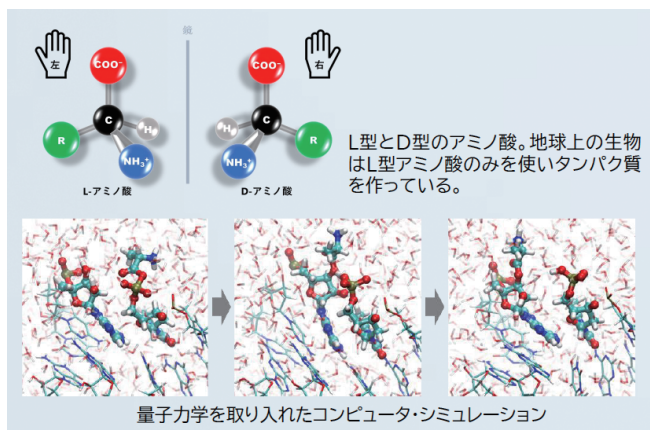
このようなコンピュータシミュレーションを利用した基礎的な研究は実学の部分にもたくさんある。近年のコロナ禍で既存の薬の中からコロナウイルスに効果のある薬を探す取り組みにも多く使われている。

「既知の薬から似た性質のものを探し、新しいウイルス治療に役立てるのはよく使われる手法です。近年はコンピュータのデータ処理により、アナログ時代とは比較にならない速さで作業が進みます。コロナウイルスのRNAワクチンや薬の製造にもかなりの効果を発揮していると思います」と言う。

安藤先生の研究室では、そのほかにもいくつかの主要な研究を行っている。

- 「DNAの結合を制御するしくみを理解する」

遺伝子情報を継承するDNAは、機能性高分子材料としても扱われるため、それらの統合を制御する技術などをコンピュータシミュレーションなどで解析・予



【図1】アミノ酸ホモキラリティーの仕組み
量子力学を取り入れたコンピュータ・シミュレーションにより明らかとなったL-アミノ酸がRNAの5'端(図左)から3'端に移動(転移)する様子

測する技術を研究する。

●「菌と戦うペプチドを情報学的に予測し、設計する」
抗生物質に変わる薬として期待される、抗菌ペプチドの機能、予測、設計などについて、機械学習や数理最適化などを利用しながら行うもの。

●「タンパク質とペプチドの結合を予測する」

アミノ酸が数十個つながってできる分子・ペプチドが体内でタンパク質と結合することで様々な機能を発揮する現象に注目したもの。コンピュータシミュレーションにより、統合の予測を行い、製薬に向けたペプチドのデザインを試みようとするもの。

他にも、「セルロースナノファイバー分散液の様子をシミュレーションで見る」、「壁や障害物の近くでの微粒子の運動を予測する」など。

学生とともに研究する

4年生は現在6名が在籍し、安藤先生が全体の研究計画を設計し、例えば100あるタンパク質を分析する時には、1人がまず10個ずつ担当してデータを収集するなどの方法で行い、解析作業などもたくさんものを扱うことが多いので、同様に作業を行う。

学部4年生の河原さん、金谷さん、中崎さんの3人は「タンパク質とペプチドの結合前と後のエネルギー差をシミュレーションで計算し、実験値との比較、検討などを行っています。それぞれ少しずつ違う課題があって、例えばエントロピーの観点から取り組んだりするということです」と話す。

また、田嶋さんは、シミュレーション研究を専門ではない人にもわかりやすく可視化することに取り組んでいる。**【図2】**

「データを可視化するアプリケーションは既にあるのですが、研究者には理解できても一般の人には分かりにくいことが多いのです。これを誰もが分かりやすく表せるようにできればと思っています。最近は生成AIがとても進化してきたため、それも利用しながら手探りで作っているところです」と話してくれた。

修士1年の中村さんは、「研究というよりまだ学ぶ方が多いです。薬とタンパク質がどのように結合し、同じタンパク質でも薬の種類によって、どちらが結合しやすいかなどを計算で調べています」と。

川合さんは、「修士課程でこの研究室に入ったばかりで、まだシミュレーションの基礎などを学んでいるところです」と。

池田さんは、去年はDNAの結合について研究して

いたので、今年はRNAの結合や、水中での解析などを行っています」と。

修士2年の戸倉さんは「炭酸カルシウムとセルロースナノファイバーの研究を行っています。セルロースナノファイバーは植物が元になった素材で、そこに炭酸カルシウムを加え粘性の変化を調べたり、分子シミュレーションで解析するなどを行っています」と。

また、関口さんは「機械学習や数理科学などの応用研究がしたくて、抗菌ペプチドの研究を行っています。機械学習でモデル化していくことで、ある程度の判断ができるのではないかと考えています」と話してくれた。

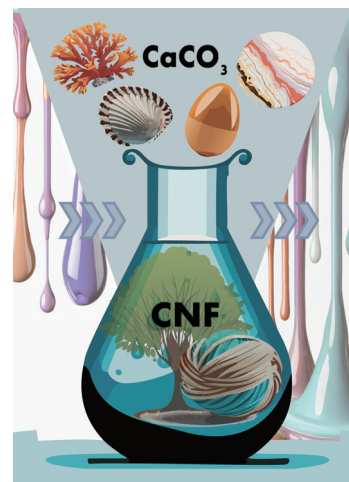
コンピュータという道具を使って生物を知る

「私がコンピュータという道具を使って研究を進めているのは、元々は生物学的に『生物はどうして自律して動けるのかを知りたい』という思いからです。たとえば人間の脳は、電力のエネルギー消費量に換算すると20ワット程度で、たった1つの電球に明かりをつけるのと同じです。また、生物はエネルギーを仕事に変える効率が70~90%と非常に高く、中にはほぼ100%と考えられる例もあり人間が作る機械・装置のエネルギー変換効率に比べ数倍高いのです。この事実を逆に捉えれば、生命の仕組みを理解することで、将来はもっとエネルギー消費を抑えたデバイスを作ることが可能ではないかと思います。生命の中にはそれほど面白いことがたくさんあるのです。

生命の仕組みを数式や理論に則って説明できたら素晴らしいと思うのです。私の所属する電子システム工学科は一見生物との関わりは薄そうですが、生物物理学は物理学、コンピュータ、プログラミングなどとの関連も深く、電気・電子系の学科であっても生物を学び、研究できるのです」と話してくれた。

太田 正人 (ジェイクリエイト)

※学年等は取材当時のものです。



【図2】学生が作成した「わかりやすい可視化データ」の例
セルロースナノファイバー分散液内の炭酸カルシウムとセルロースナノファイバーの関わり方