

支部だより

～東北支部からのお知らせ～

吉留 崇¹, 関 安孝², 佐々木一夫¹

¹ 東北大学大学院工学研究科

² 高知大学医学部

東北支部より、東北地区に最近着任した会員の自己紹介と支部の活動報告をお届けします。

吉留崇, CXDI 実験データ分類ソフト「閻魔」と共に東北へ

2014年10月に、東北大学大学院工学研究科に助教として着任致しました。研究室は、応用物理学専攻の佐々木研究室になります。出身は鹿児島、九州大学で学位取得後は、京都大学、横浜市立大学でポストドクと特任助教を経験しました。順調に北上しております。

私は現在、X線自由電子レーザー (XFEL) を用いたコヒーレント X線回折イメージング (CXDI) 実験データの分類について、理論的に研究を行っております。慶應義塾大学の中迫雅由教授、及び横浜市立大学の池口満徳教授との共同研究になります。近年、細胞やウイルス等の非結晶単粒子に XFEL-CXDI 実験を適用する研究が進められています。XFEL の強度が非常に強く、1度の照射で粒子が破壊されてしまうため、膨大な量の粒子を用意し、順番に XFEL を照射します。最近では、得られたデータから3次元電子密度分布の再構成に成功し始めております。しかし、3次元電子密度分布の解像度が低い事が問題となっております。この原因は、照射する粒子ごとに構造が異なる事を無視しているため、像がぼやけているためと考えられます。従って、再構成の前に構造の違い (構造多形) の観点からデータ分類を行う事で、解像度の向上が期待されます。

そこで私は、マニフォールド理論を用いた XFEL-

CXDI 実験データ分類ソフトウェア「閻魔」を作成しました。この実験を想定したシミュレーションを行い、構造多形の観点からのデータ分類に成功しました。今後は XFEL-CXDI 実験データに適用する予定ですが、低温電子顕微鏡データや高速 AFM データ、さらには分子動力学 (MD) シミュレーションデータの解析へも応用したいと考えております。

以前は、京都大学の木下正弘先生の下で、水のエントロピーに主眼を置いたタンパク質折り畳み・変性・機能発現機構の研究を行ってまいりました。特に F₁-ATPase の回転メカニズムの研究で、2010年度の日本生物物理学会 若手奨励賞を頂きました。現在もエントロピーに関する研究は続けております。ただし対象は、水からタンパク質・リガンドに変わりました。創薬等の研究に不可欠な結合自由エネルギーを計算するには、構造エントロピーを定量的に計算する方法が不可欠です。そこで現在、MD シミュレーションを用いた構造エントロピー計算法について、横浜市立大学の学生及び池口満徳教授と研究しております。将来的には、創薬等への応用が出来ればと考えております。

演習の授業、学生の研究指導等も始まりました。写真は、「基礎ゼミ」という東北大学 学部1年生向けの授業の1場面です。このゼミでは、専攻の幾つかの研究室が、研究に関する入門的な講義と実習を行います。私も研究室の大学院生と共に、タンパク質の入門的な講義と MD シミュレーションの実習を行いました。また、オープンキャンパスや高校生の体験学習にも積極的に関わっております。これらを通し、学生に生物物理学に興味を持ってもらえればと考えております。

私が所属する佐々木研究室は、震災後何度か引っ越しを行い、私の着任とほぼ同時に青葉山キャンパスの現在の居室 (電子情報システム・応物系1号館) に落ち着きました。耐震もしっかりした綺麗な建物で、充



基礎ゼミの様子 (発表者: 吉留)

E-mail: t4yoshidome@camp.apph.tohoku.ac.jp (吉留)

E-mail: sekiyasu@kochi-u.ac.jp (関)

E-mail: sasaki@camp.apph.tohoku.ac.jp (佐々木)

実した研究生活を送る事が出来ています。この恵まれた環境下で、研究・教育等に精進します。どうぞよろしくお願い致します。

(吉留崇)

東北支部の活動報告

毎年恒例の支部会を2015年12月18日(金)午後、東北大学青葉山キャンパスの工学研究科電子情報システム・応物系1号館にて開催しました。今回の支部会では、招待講演2件のほか、一般の研究発表もすべて口頭発表で行うことにしました。生物物理学会年会では口頭発表をする機会の少ない学生たちにも、口頭発表の機会を提供したいという考えによるものです。講演時間を10分(質疑応答含む)と短く設定して、学生の参加を積極的に呼びかけたところ、16件の一般講演のうち13件が学生による発表となりました。十分な質疑応答の時間を確保することはできませんでしたが、各講演に対して、2~3の質問があり、発表をした学生にはいい経験になったのではないかと思います。ただし、ポスター発表の講演を募集しなかったため、発表件数は例年より少なく、参加者も35名と少なめでした。参加者の内訳は、学生21名、教員11名、その他(ポスドクなど)3名です。参加者を増やすためには、従来のようにポスター発表も取り入れることが必要なのかもしれませんが。

招待講演には、立命館大学薬学部の北原亮先生と産業技術総合研究所創薬基盤研究部門の亀田倫史先生をお招きしました。北原先生は「静水圧およびガス圧NMR法によるタンパク質の構造揺らぎ研究」、亀田先生は「分子シミュレーションを利用した創薬研究」という題目で講演を行いました。以下に、招待講演の内容を紹介いたします。

北原さんからは、多次元NMRを使ったタンパク質の揺らぎの研究についてお話いただきました。タンパク質は柔らかく、内部にキャビティ(空隙)が存在することが知られています。タンパク質内部キャビティがタンパク質の動的性質(構造揺らぎ)の源である、というのが北原先生の哲学です。最近のご研究では、酸素分子を混入した溶液状態でNMRを測定し、酸素分子がキャビティに導入されることを検出しました。タンパク質内部のキャビティに酸素分子が到達できるのは、キャビティ付近の構造が揺らいでいるからだとして推測されます。このような揺らぎが存在することを検証するために、分子動力学シミュレーションをも実行されたことに感銘を受けました。



懇親会二次会へ向かう途中での撮影。12月の仙台はイルミネーションが綺麗です。

亀田先生からは、分子シミュレーションの基本的な話から始まり、多様な応用例を示していただきました。筆者(関)が知る亀田さんは、タンパク質などの生体高分子の研究者なわけですが、実際にはカーボンナノチューブなど材料工学の研究もご紹介いただきました。分子シミュレーションを武器に多様な研究領域の問題に取り組む姿勢に感銘を受けました。亀田さんは一体いつ休んでいるのでしょうか。また、分子シミュレーションの基本的な話をして下さったお陰で、大学院生など若い人からも質問を受けているのが印象的でした。

口頭発表終了後に、東北支部の総会を開催し、新役員を選出しました。また、支部講演会において講演会賞のようなものを作ってはどうかという提案がなされ、今後の検討課題とすることになりました。

総会後には、講演会会場前のロビーで立食形式の懇親会を開催し、小一時間ほど参加者同士の交流を図りました。さらにそのあとは招待講演の講師と有志で仙台市内に繰り出し、懇親を深めたことはいまでもありません。盛り上がりすぎて、懇親会、その後の二次会も含め、写真を撮るのをすっかり忘れてしまいました。

最後に、定例の支部会の開催のほかに、昨年度の活動として、東北支部の規約を制定し、支部のホームページ(<http://biophys-tohoku.jp>)を開設したことを報告いたします。今後、支部会のメンバー交流などに役立っていくことと期待されます。ホームページの内容はまだこれから充実すべきところもありますが、支部会の情報や東北地区の生物物理関連の研究室一覧などもあります。是非一度立ち寄ってみてください。

(関 安孝・佐々木一夫)