

【産業技術】 ナノテク

最大の生命化学コンピューター・シミュレーション(米国)

- 生命の最も根本的なナノマシンを模倣 -

ロスアラモス国立研究所の研究者は、初めて原子 100 万個のコンピューター・シミュレーションを実行する新しい世界記録を作った。"Q マシン"スーパー・コンピューターを使用して、ロスアラモスのコンピューター科学者は、細胞のタンパク質を作る構造であるリボソームの分子シミュレーションを開発した。

264 万個からなる動作中の原子をシミュレーションするこのプロジェクトは、現在までに行なわれたどの生物学シミュレーションより 6 倍以上も大きい。

リボソームは、すべての生物内部でタンパク質合成を行う原始の分子工場である。この新しいツールを使用して、ケヴィン・サンボンマツの率いるロスアラモス・チームは、原子規模で動作中の全リボソームを初めて観察する。この初めてのリボソーム・シミュレーションは、炭疽菌のような疾病の潜在的な抗生物質ターゲットを識別する新しい方法を提供する。

これまで、リボソームの静止したスナップ写真構造のみが利用可能だった。この研究を記述した論文は、米国科学アカデミー10月24日版の会報に報告されている。

この技術は分子機械を理解し、抗生物質の有効性を改善するための強力な新しいツールを提供する、とサンボンマツは断定する。抗生物質は大きさがリボソームの 1000 分の 1 以下で、細胞機械内でモンキーレンチのように作用する。このような抗生物質は、この分子機械の最も重要な場所へ拡散し、リボソームの内部作業を停止させる。

「リボソームの静的構造だけに基づいた薬剤の設計は、レーダー情報無しで発射位置および目標位置のみが解かったミサイルを撃墜することと類似している。このシミュレーションによってミサイルの軌道経路を解読することができる」とサンボンマツは語った。

「この方法とその関係は、生化学、計算機科学、分子生物学、物理学、構造生物学および材料科学の間の接合面に位置している。新興分野のナノスケール情報処理での人工分子機械と同様のシミュレーションを行なう材料科学者、化学者および物理学者のための原理実証としてこの結果は役立つと信じる」とサンボンマツは語る。

サンボンマツの研究は、RNA からタンパク質へ情報が転送される細胞内のタンパク質合成中の本質的な局面の解読に注目し、1958 年にフランシス・クリックによって特定され、分子生物学のセントラルドグマとして知られている情報の流れを完成する。

「リボソームは実際ナノスケール・コンピューターであり、細胞の CPU として非常に類似している」と彼は語る。リボソームは生命にとって非常に根本的なので、この分子機械の多くの部分は、これまで遺伝子検索されたすべての生物の中で同一である。

プロジェクト展開中に、チームは解読が生じるために転移 RNA が渡さなければならないリボソーム内部の通路を識別した。また、それは普遍的な基礎からほとんど完全に造られるように見え、進化的に原始的であることを暗示している。この通路は、リボソームの新しい領域を示し、様々の潜在的な新しい抗生物質ターゲットを含んでいる。

このシミュレーションは、さらに、本質的な翻訳分子である転移 RNA が、解読が行われる 2 つの場所において自由度がなければならないことを明らかにし、転移 RNA がリボソームの機械的動作の主役であるという考えをさらに高めている。シミュレーションは、また新しい構造ゲートとともに、調節に重要な 20 の普遍的に受け継がれているリボソームの基礎を識別することにより、解読についての将来の生化学研究のお膳立てをする。それは、転移 RNA 抽出中の制御機構としての役割をする。

この数 100 万個の原子シミュレーションは、"Q マシン"の利用可能な 8,192 プロセッサの 768 個で実行された。このシミュレーションを開発するために、サンボンマツはロスアラモスのチャン=シュン・ツンクとともにカリフォルニア大学サンディエゴ校のシンプソン・ジョーゼフとともに研究を行った。

この研究の資金提供は、国立衛生研究所、ロスアラモス国立研究所の研究開発資金そして研究所の所内計算プロジェクトからの支持により提供された。

以上

(出典: http://www.lanl.gov/news/index.php?fuseaction=home.story&story_id=7428)