

自己集合を利用したタンパク質のカプセル化

Protein encapsulation within synthetic cages

京都大学 高等研究院 藤田大士

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを、合成対象分子の設計に活用している。三次元分子構造の内部に適当な大きさの空洞があり、その中に他の分子を包接する異分子複合体を「ホスト-ゲスト化合物」と呼ぶ。前者の骨組みを作る分子がホスト、後者の骨組みにはいり込んでいる分子がゲストである。このホスト分子を設計するにあたり、空洞のサイズ、および空洞を規定する分子骨格上にどのような官能基が配置されているかは、系の特性を決定する極めて重要なパラメータとなる。今回は、内部にタンパク質分子を包接する巨大分子を合成し、合成分子-タンパク質複合体を実現するために、BIOVIA 社製 Materials Studio, 同じく BIOVIA 社製 Discovery Studio、富士通社製 SCIGRESS を用途に応じて組み合わせながら分子設計を試みた。分子モデリング、および Materials Studio の Forcite など古典力学計算を用いた構造最適化を通して、目的のタンパク質を包接するに十分な内部体積を有する分子の骨格に大凡の目処をつけることができた。現在は、分子の自己集合現象を活用し、モデリングした目的の分子骨格を形成する条件を鋭意検討中である(WET 実験)。分子自己集合実験の結果は随時分子設計にフィードバックする予定であり、その度に分子設計の部分修正とモデリングによる確認を行う。