



研究成果

戦略的創造研究推進事業さきがけ
研究領域「生命機能メカニズム解明のための光操作技術」
研究課題「構造情報を基にした新規チャンネル型抑制性光遺伝学ツール開発」

光によって活性化される天然型、人工型の陰イオンチャンネルの構造を明らかに
新しい光遺伝学ツールの開発に成功

神経細胞は、細胞膜にあるたんぱく質であるイオンチャンネルが開閉し、イオンが出入りすることで活動します。そのため、光照射によって活性化するイオンチャンネルを脳の神経細胞に埋め込むと、光を用いて神経細胞を刺激あるいは抑制することができます。この方法は光遺伝学とも呼ばれ、注目を集めています。

陰イオンを通す光駆動性のイオンチャンネルは、2014年に人工的に開発され、翌年には自然界から発見されました。これらは神経活動を抑制する上で重要ですが、神経を活性化させる光駆動性の陽イオンチャンネルより研究が遅れており、改良のためには詳細な立体構造の解明が求められていました。

米国スタンフォード大学の加藤英明

博士研究者らは、X線結晶構造解析により、天然型であるGtACR1と人工型であるiC++という2種類の光駆動性陰イオンチャンネルの立体構造を高い解像度で決定しました。さらに、立体構造情報を基にGtACR1に変異を導入し、陰イオンを良く通すという性質を保ったまま素早い開閉を実現させたFLASHと呼ばれる新しい陰イオンチャンネルを開発しました。

神経活動のより精密な制御ツールとして、これまで困難だった光遺伝学実験を



(左)天然型光駆動性陰イオンチャンネルGtACR1の結晶構造。FLASHの開発に当たって導入した変異部位を青と緑の球体モデルで示している
(右)人工型光駆動性陰イオンチャンネルiC++の結晶構造

可能にし、ヒトの脳機能やパーキンソン病など神経疾患の理解が進むことが期待されます。



開催報告

日本科学未来館

携帯電話からオリンピックメダルを作る理由

使用済みの家電製品を集め、その中に存在する金・銀・銅を回収してオリンピックメダルを作る「みんなのメダルプロジェクト」(運営:東京2020組織委員会)が2017年4月から始まりました。

9月1日に日本科学未来館(東京・お台場)で、資源リサイクルについて考えるイベントを開催しました。講師は物質・材料研究機構の原田幸明名誉研究員です。

イベントでは天然資源である金属の大量採取や、使用後の家電製品の不適正な処分が大きな環境破壊をもたらしている現状が紹介されました。さらに、家電製品のリサイクルは枯渇しつつある金属資源を確保するために必要なだけでなく、環境破壊を防ぐ行為である

と、その重要性も語られました。

しかし、国内ではリサイクルが進まず、約9割が家庭で眠ったままだそうです。「リサイクルに良いイメージを持たない人が多いことや、小さい家電は家庭に置いたままでも邪魔にならないことが回収されない理由」と原田先生。参加者からは「リサイクルの最初の段階を消費者が担っていることを知った」「リサイクルに積極的に参加したい」といった声が多く聞かれました。



家電製品のリサイクルの大切さを語る原田名誉研究員

日本科学未来館では今年12月27日まで、館内に「使用済み携帯電話回収ボックス」を設置し、同プロジェクトに協力していきます。



研究成果

イノベーションハブ構築支援事業
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

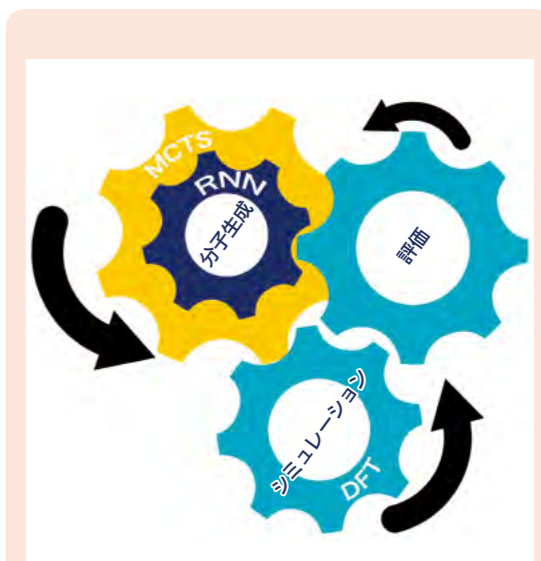
AIによる合成可能な有機分子の設計とその実験的検証に成功

深層学習による人工知能(AI)技術の発展によって、複雑な有機分子の設計が人手を介さずにできるようになってきています。しかし、設計された分子の構造は自然界に存在する分子や過去に合成された分子の構造とはかけ離れていることが多く、安定に存在できるのか、実際に合成できるのか、望みの特性を示すのかなどについてはわかっていませんでした。

理化学研究所革新知能統合研究センターの隅田真人特別研究員、津田宏治チームリーダー、物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点の石原伸輔主任研究員、田村亮主任研究員らは、量子力学に基づいた分子シミュレーション技術(DFT)とAI技術で

ある再帰型ニューラルネットワーク(RNN)、囲碁AIにも使われているモンテカルロ木探索法(MCTS)を組み合わせることにより、光の吸収波長を対象とした分子設計を実行し、望みの性質を有した合成可能な分子を設計することに成功しました。さらに、数個の分子を実際に合成して望みの特性があることを確かめました。

将来、太陽電池の集光材料や電気貯蔵材料、有機EL用の発光といった有機エレクトロニクス分野における機能性分子の開発が加速すると期待されています。



AI技術による有機分子設計のフロー図



開催報告

ライフサイエンスデータベース統合推進事業
バイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)

医学への応用やデータベースの統合を議論
トーゴの日シンポジウム2018を開催

バイオサイエンスデータベースセンター(NBDC)は10月5日、「トーゴの日シンポジウム2018~バイオデータベース:つないで使う~」を日本科学未来館(東京・お台場)で開催しました。

生命科学分野におけるデータベースの統合と利活用について、大学や研究機関、企業などから約300人が参加し、ともに考え議論を深めました。当日は2件の招待講演と11件の口頭発表などがありました。

今年は新しい試みとして、医学に関する4つのデータベースについて開発者と利用者がペアとなり、データベースを活用した創薬研究などの利用例と、将来への期待や展望を発表しました。また、もう1つの新企画であるワークショップでは、



ワークショップで利用者の質問に答えるデータベース開発者チーム



63件のポスター発表も行われました。

データベースの連携がもたらす効果や詳しい使い方について、利用者と開発者が直接意見を交わしました。

参加者からは「バイオ関連のデータベースが一堂に会する貴重な機会だ」「初めての参加でしたが大変勉強になりました」などの声が聞かれました。講演

動画やポスター発表のデータは近くウェブサイトで公開します。

トーゴの日シンポジウム2018ウェブサイト
<https://events.biosciencedbc.jp/sympo/togo2018/>