

2014年(平成26年)7月11日 金曜日

名古屋大大学院の岡崎進教授(応用化学)と九州工業大情報工学研究院の入佐正幸准教授(溶液化学・生物物理)が、感染症ウイルスが人間の体内でどう動くかを再現した3D(立体)動画を作った。約650万個の原子の動きを理化学研究所のスーパーコンピューター「京」で計算して画像化したもので、世界で初めてという。人に感染する様子の画像化も進めており、抗ウイルス剤の開発などに役立つと期待される。

九工大の入佐准教授ら

ウイルスの動き3D化



入佐正幸准教授

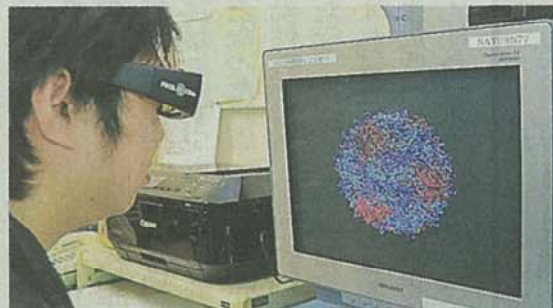
3D動画は、構造が原始的なポリオ(小児まひ)ウイルスについて作成。同ウイルスは4種類のタンパク質分子で構成される球体の「殻」を持っており、これが人間の細胞の受容体に結合して感染が起きる。

薬や治療法の開発に道

東京大名誉教授の野本明男微生物化学研究所理事(ウイルス学)の話、ポリオウイルスと水溶液の全原子の運動を計算しウイルスの殻の動き方を解明したのは驚きだ。画期的な成果といえる。計算量が膨大なため「京」を使わないとできない研究だった。研究が進めば、抗ウイルス剤だけでなく、さまざまな治療法の可能性につながる基礎的研究となるだろう。

岡崎教授は、人間の体液、窒素など5種類の原子をはに見立てた37度の水溶液中、はじめ、ウイルスと水溶液の間のウイルスの動きをシミュレーション。殻のタンパク質分子を構成する炭素、算し、これを1億回繰り返

世界初、「京」活用



して連続的な動きを再現したデータを基に、入佐准教授が動画を作成した。動画は25ナノ秒(1億分

の2・5秒)間のウイルスの動きを2分45秒のスロー動画で再現し、殻のタンパク質分子がどう動くか分かりやすくした。3D眼鏡で見ると、タンパク質分子が細かくうごめく様子を立体的に見ることが出来る。

岡崎教授らは現在、人間の受容体も含めた1千万個の原子の動きの計算に取り組んでおり、9月末を目標

ポリオウイルスの「殻」の動きを表した3D動画。色の違いはタンパク質の種類を表す
九州工業大情報工学部

にウイルスが受容体に結合する3D動画を作成する予定。原子レベルの動きが可視化されることで、結合を阻む方策の研究が進むことが期待され、ポリオと似た構造のウイルスが感染原因となるA型肝炎、子宮頸がん、家畜伝染病の口蹄疫などにも応用できるとい

岡崎教授は「ウイルスが人間の細胞にどれくらい接近すれば、引力が働いて結合するかなどを突き止め、感染の仕組みを具体的に解明したい」と話している。
(野津原広中)