

だけじゃない中堅を目指して



浴本 亨

Toru EKIMOTO

横浜市立大学大学院
生命医科学研究科助教

部会名：構造活性相関部会

「やっぱりね！ そうだと思った！」 分子動力学シミュレーション(MD)の構造モデルをみて、実験家が納得する瞬間がある。実験家のイメージが原子レベルで具体化されると、様々な議論が進む。要望に答えていくと計算方法等の拡張が必要になり、自然と発展性もでてくる。実験と計算の連携が、こんなにも厚みのある研究につながるんだ、とワクワクした。生体分子や化合物をコンピュータ上で動かすMD業界へ入門し10年がたった。スーパーコンピュータ「京」プロジェクトで実際に手を動かして体感した技術発展には勢いを感じた。入門当時、ラボレベルのコンピュータ上ではタンパク質がプルプルと震えているだけだったものが、現在ではある程度の構造変化を捉えられるようになり、様々な実験データと比較できるようになりつつある。そうなる、計算の情報は実験家の想像力を刺激するレベルになるらしい。今後も、連携を通してMD好きな実験家を増やしたいし、動きを扱うタンパク質の構造変化と機能発現/調整メカニズムの関係といった広義の構造活性相関解析を通して日本薬学会へ貢献したい。

さて、10年後を考えると悩みばかりだ。まだ、私には二つ名がない。上の世代を見渡すと「～の人」という個性で認識される方ばかりだ。計算の若手で集まった際に、上の世代の先生達を野球やサッカーのポジションに当てはめたらどうなるかを考えたことがある。研究の個性やスタイルを考慮していくと、面白いように各ポジションが被らずに埋まる。中核メンバーのバランスの良さに驚いたが、やはり、中核となるには個性が必須なことを強く認識した。もう、計算できるだけでは物足りない。様々な研究との関わりがある好環境を活かし、スーパーコンピュータ・実験連携・創薬テイストのスタイルで一軍レギュラーを目指したい。

キーワード 生体分子シミュレーション、スーパーコンピュータ、構造生物学

Copyright © 2021 The Pharmaceutical Society of Japan

生体内化学反応の仕組みを探る



牛丸理一郎

Richiro USHIMARU

東京大学大学院薬学系
研究科助教

部会名：生薬天然物部会

学部生時代に化学反応理論や分子レベルでのものづくりに興味を持ち、学部4年から大学院修士課程修了までの3年間は名古屋大学理学部化学科で有機合成化学を学んだ。中寛史先生(現・京大院薬)のご指導のもと、反応速度論や理論計算を用いて遷移金属錯体が触媒する化学反応の機構解明に従事した。触媒反応を深く理解する難しさを学んだ一方で、様々な化学的手法を組み合わせて仮説を検証する面白さを感じた。また触媒化学を学ぶ中で、生体内において多くの夾雑物の存在下でも圧倒的な選択性と効率を示す酵素の反応機構にも強い興味を抱いた。そこで、大学院博士課程では米国テキサス大学オースティン校に留学し、Hung-wen Liu先生のご指導のもと、有機化学を基盤とした天然物の生合成研究と酵素反応機構に関する研究を行った。具体的には、ナス科植物のヒヨスなどが生産するトロパンアルカロイドの生合成を担う鉄酵素の興味深い反応機構を明らかにした。また、放線菌が生産する含硫ヌクレオチド天然物の生合成経路を解明し、有機硫黄化合物を構築する新規ラジカル酵素反応を同定した。日本とアメリカで計8年間大学院に在籍したが、腰を据えて研究に向き合える有意義な時間であった。

学位取得後、2020年に東京大学大学院薬学研究科の阿部郁朗先生のもとで新たな研究をスタートした。ポストゲノム時代となり、国内外で天然物化学の研究が発展しているが、自然界には依然として多くの未開拓酵素群が眠っている。多様な生物種から有機化学の常識を打ち破るような酵素反応を発掘し、その触媒原理を解き明かすことで、薬科学の進展に貢献していきたい。

キーワード 天然物、生合成、酵素

Copyright © 2021 The Pharmaceutical Society of Japan

