

## 原子から細胞へ—MD 法と歩んだ20年

前橋工科大学生命情報学科 准教授 優 乙石 (平成15年大学院物質工学科修了)

計算機の急速な発展によって、細胞レベルの生命現象を原子・分子の運動状態から微視的に解明する事が射程圏内に入っている。蛋白質などの生体分子の立体構造、ゆらぎ、拡散などに関しては古典力学が支配している。故に原子間に働く力さえ正しく記述できていれば、運動方程式を繰り返し解くことによって分子集合体全体の動きが再現できる。得られた結果は、統計力学を通じて熱力学的に議論できる。このように物質のふるまいを分子レベルで理論的に解明する手法を分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法と言う。私はこのMD法を使って現在まで生命現象を微視的に研究している。計算生命科学とよばれる分野の一つである。

学生時代にはセルロース誘導体の立体構造をMD法により調査した。研究員時代は、深海などの極限環境に住む生物が細胞内に蓄積する分子の振舞いを研究した。当時はまだ今ほど計算機が速くなく、せいぜい数万原子の挙動を数十ナノ秒シミュレートするのが限界であった。私の状況が一変したのは2013年からである。当時、世界最速を誇っていた理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用した細胞スケールのMDシミュレーション計画に参加する機会を得た。国際研究チームのトータル5年間の研究によって、世界最大規模の細胞質シミュレーションを実現する事が出来た。これはマイコプラズマと呼ばれるバクテリアの細胞全体の約10%を原子レベルで忠実に再現したもので、約1億個の原子から構成される巨大なモデルである。その中に含まれる原子一つ一つの運動方程式を数千万回解くことによって細胞内の分子の振舞いを解き明かすことができた[1-3]。

一方で、このシミュレーションは時間規模にして130ナノ秒である。現在の最高レベルの計算機をもってしても細胞丸ごとの(生物学的な時間規模の)MDシミュレーションを実行することは不可能である。しかし、蛋白質1分子の100ナノ秒が限界



であった2000年初頭から、今や1ミリ秒のシミュレーションが可能となっている。すなわち20年間で時間規模にして1万倍の飛躍が実現されている。人類史上、ここまで急速に発展した道具はかつてないだろう。今後の発展が楽しみである。

ふりかえれば、様々な科学技術の急速な発展の中で、MD法一筋で現在まで20年間研究を続けてこられたのは非常に幸運だったと思われる。この幸運とは、つまり良き師との出会いに他ならない。MD法を中心とする計算生命科学の世界に入るきっかけをくださった大学院博士前・後期指導教官の上田一義先生、研究員としての最初のキャリアを丁寧に導いてくださった長岡正隆先生(名古屋大学情報科学研究科)、初めての教員生活を温かく見守ってくださった中田恭子先生(青山学院大学化学生命科学科)、世界最高の研究環境と国際的な経験を与えてくださった杉田有治先生(理化学研究所)にこの場を借りて厚く御礼を申し上げる。

- [1] 論文: I. Yu, T. Mori, T. Ando, R. Harada, J. Jung, Y Sugita, M. Feig eLife 2016;5:e19274
- [2] プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/press/2016/20161101\\_3/](http://www.riken.jp/pr/press/2016/20161101_3/)
- [3] youtube: <https://www.youtube.com/watch?v=2JU2LjPDrQY>

## 人と社会と化学

横浜国立大学 大学院 環境情報研究院 教授  
松本真哉（平成13年大学院博士課程後期修了）

同窓会から本特集への寄稿依頼を頂き、化学に関わる研究開発活動について、最近、筆者が考えていることを紹介することにした。まずは筆者の経歴を紹介し、その後に主題について述べる。

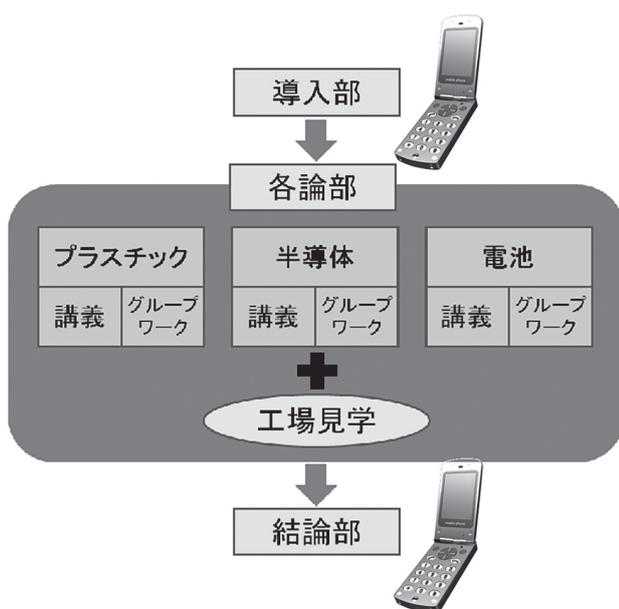
常々、講義などの最初に学生に詫びることが定形になっているが、筆者の学生時代はとてども将来教壇に立つとことを想像できるものでは無かった。一浪の末、滑り止めの大阪府立大学工学部に進学し、その不本意感から勉学には足が向かず、学内外で遊び呆けていた。3年生での一度の留年を経て、4年生で機能性色素化学の研究室に配属されたことが、恩師との出会いも含めて、筆者の人生を特徴付けることになった。4年時にようやくこのままではマズイという気持ちになり、研究室配属後はよく勉強した。またテーマとして与えられた色素の結晶化とX線構造解析の実験も楽しかった。修了後は更に色素結晶の研究を続けたい気もしたが、結局、有機分子性材料を素材として活用している企業での就職を考え、恩師の推薦でシャープ株式会社に入社することになった。シャープは、今では海外企業の支援を受けた会社だが、筆者が入社した1994年頃は液晶のシャープとして世界に名を轟かせており、20年後に倒産の危機に陥るなど、誰一人として想像していなかった。配属は、入社面接までに全く想定していなかった液晶パネル製造工場のプロセス技術部門で、液晶パネルの分断工程というガラスの切断プロセスの技術改善や開発が最初の業務であった。入社面接までは、有機色素に関係するカラーフィルターの開発部門への配属という話で進んでいたの、実際の配属決定時には驚いたものである。その驚きとなぜこんなキャリアの人材を？という疑問も持ったが、同期に経営工学の出身者がおり、企業の立場と仕事の内容などについて彼からいろいろと教えてもらい、その後の仕事に前向きに取り組んだ。就職を決めた時に、企業で働く場合でも仕事と関連する内容で学位は取りたいと考えていた。しかし勤務した会社ではそのようなキャリアは容易ではなく、その当時お世話になった第二の恩師ともいえる職場の上司の後



押しもあり、三年で退社し博士課程に進学することにした。この時、再度、大学時代の恩師に幾つかの研究室を紹介してもらい、横浜国大にいる方の研究室を紹介してもらった。これが筆者と本学の出会いである。国大進学後は、色素結晶の構造物性相関の研究に取り組み、山あり谷ありではあったが楽しく充実した4年間を過ごした。学位取得後の一年間は日本学術振興会の博士研究員として理化学研究所で勤務し、その後2002年に、今は改組で消滅した本学の旧教育人間科学部の地球環境課程に奉職した。この組織での勤務経験を基に立ち上げた新しい研究課題が、その後の筆者の研究者として最初の転機になった。

学生時代には環境問題には何の興味もなかったが、工場勤務を通して実務的な環境問題の知識や経験を身に付けた。そこで地球環境課程では、環境問題とその解決に興味を持つがあまり化学に興味のない学生向けに、環境問題における化学の重要性を意識してもらうことを念頭に、初等化学結合論や分光学などの講義や実験を担当した。一方、研究は、会合体形成や固体蛍光などを示す機能性色素の構造物性相関に関する課題を続けていた。この課程での教育を進める中で、あるもやもやとしたものを感じるようになった。詳しくは日本LCA学会誌で述べた（日本LCA学会誌, 2009, vol 5, 338）が、端的に言えば、環境に興味を持ち大学に来た学生の将来の職業観の狭さである。このもやもや感が契機になり、毎日の生活と密接に関係する環境教育プログラムの開発を始めることにした。そしてこの新しい研究教育活動

に伴い、ライフサイクルアセスメント（LCA）の考え方を知り、関連する学会に関与するようになった。今では、日本LCA学会の環境教育研究会の主査や学会誌の編集委員を担当している。現在、いろいろな対象に実践しているプログラムの概要図を示す（日本LCA学会誌，2009，vol 5，393）。タイトルは、携帯電話（スマホ）と環境問題!? - 私たちの生活を環境のつながり -、とすることが多い。今では携帯電話は死後に近いが、活動を開始した2007年頃の名残である。このプログラムの重要な教育要素は、私たちの日常生活と環境問題のつながりに気づくことである。導入部では、私たちが毎日利用している様々な製品やサービスのライフサイクルを考えることで、全ての生活行動に多様な環境問題とのつながりがあることを示す。そして受講者には、自分自身が環境問題の要因になっていることに気づいてもらう。筆者や類似の環境教育に関わる研究者達は、この「気づき」の無さが、現在の私たちが抱える環境問題の一つの要因ではないかと考えている。このプログラムでは、導入部での気づきの後に、日常生活で重要かつ携帯電話に利用されているプラスチックなどの素材のライフサイクルの基礎知識を学ぶ。その後、グループワークを行い学びの理解の深化を図る。このプログラムは、中学生、高校生、大学生、市民、教員、若手技術者など、いろいろな対象に実践を続け、最近では環境配慮行動に対する教育効果などの研究にも展開している。



このような環境教育に関する教育研究活動に取り組みながら、従来の機能性色素の研究も続けていた。そして2011年の3月に、第二の転機となる東日本大震災とその後に発生した原子力発電所の重大事故を

体験した。事故後に拡散された放射能の影響について判断できない状況の中、指導する学生の対処に苦慮すると同時に、化学に関わる仕事をする立場でありながら原子力発電や放射能に関する知識の無さを恥じた。また同時に、ライフサイクルの考え方に関わる環境教育に取り組んでいるにも関わらず、自分の使うエネルギーに関してあまりにも無関心であった事を猛省した。事故後すぐに、北欧の共同研究者から連絡をもらった。彼女はチェルノブイリ原発事故の経験から非常に放射能汚染について神経質であり、筆者が論文を書くくらいの仕事場と一部屋くらいベッドルームはあるからすぐにこちらに来なさい、場合によっては家族を連れておいで、という内容のメールだった。このメールと、その後の社会の動きを見ながら、自身の研究活動について自問した。自分が所属する社会が非常事態になった時に、“効率が数%向上した”や“このような挙動を初めて見出した”という研究をしていて良いのか、という問いである。更なる非常事態も想定される中で、数年後やもっと先の将来の課題を考える気になれなかった。人の幸せや社会の安定性が揺らぐ状況があるなら、その状況を少しでも良い方向に変えるための研究や教育活動に取り組むべきではないかと強く感じた。環境教育に関与していなければ、このような悩みを抱える事は無かったかも知れない。しかしその時に筆者は、人の幸せや社会の持続安定性にもっと直接的に関与することも、化学に関わる専門家の役割であろうとの結論に至った。そして、環境教育という形で毎日の生活と環境のつながりを、化学の視点も含めて多くの人に伝えることをその後の活動の軸に決めた。これ以降、環境教育の教育活動を起点として、いろいろな社会活動や啓発活動に参加し現在に至っている。一方、学生時代の楽しかった体験に基づく色素結晶の研究から離れることは難しく、その課題はそれなりの重みで継続している。

2012年に消費者教育推進法で示された消費者市民社会という社会像がある。これは、持続可能な社会形成に向け全ての市民が責任ある消費を実行する社会である。化学に関係する方なら瞬時にわかると思うが、現在のように、その素性或履歴が分からない多くの化学物質と関連製品に囲まれている日常生活の様々な場面で、持続可能な社会形成に資する責任ある行動を選択することは、幾つかの限られた場面を除くと不可能に近い。化学に関係しない普通の市民にとっては、当然この選択は到底無理であるとか思えない。しかしこの点については、これまでの社会がそのような判断を消費者に求めない前提で構

築されてきた、という見方をすべきである。そのシステムを根本的に見直すことで新しい社会の実現が可能になる。例えば日本の物質消費に関して考えると、これまでほとんどを輸入に頼る天然資源をまるで無尽蔵のものを利用するかのごとく利用し続けてきた。このような物質利用の在り方について、幾つかの境界を想定した化学物質や関連製品の持続可能的利用を前提にしたシステム設計をすれば、消費者が責任ある消費を具現化することは夢ではない。このような課題こそ、これからの化学の研究に求められる題材だと考えている。実際、国外では、サーキュラーエコノミー(CE)と呼ばれる資源の循環利用を根本的に見直す新しい経済の考え方が大きな潮流になりつつある。CEの考え方は、かなりの部分は欧州におけるビジネスとしての戦略的性質があるが、経済構造の基盤に資源やエネルギーの持続可能的利用を前提にしたシステム設計があり、先ほど紹介した消費者市民社会の実現と重複する部分がある。英国でCEを推進するために設立されたエレン・マッカーサー財団のCE100と呼ばれるプログラムには、すでに世界を代表する様々な企業が参加しており、日本の大手企業も徐々に参加を始めている。またCEとは少し方向性は異なるが、SDGs(持続可能な開発のための目標)も今後の研究開発を考える上で重要性が増していると感じている。化学に関しては、化学という学理に沿った技術開発や資源、水、エネルギーなどに関する目標だけでなく、貧困のない平等な社会実現や健康、福祉、教育などの目標に

関わる化学の在り方も考える必要がある。SDGsは、すでに多くの国内外の企業が自らの企業活動の特徴付ける要素や新しい事業の核として活用している。ここで紹介した三つの内容は、全て「社会」を変えるということに関係する。しかし、「社会」を変えるためにはその社会に属する「人」も変える必要がある。消費の決定権は、消費者にある。消費者が、消費者以外のステークホルダーが提案する経済価値を、新しい価値として受け入れなければ、新しい社会の実現は難しいだろう。ライフサイクルの考え方を基に自らの生活と環境のつながりに気づくことは、新しい価値の受け入れに向けた第一歩であると考え、筆者はこの「人」を変えることに注力している。個人的には、できればもっと多くの化学者に、時代の変化の速さに対応した「社会」か「人」を変える研究に関与して欲しい。前者の例は、前述した物質利用の根本を変えるような素材の研究である。後者の例は、身近な化学物質の学びを基礎に消費に寄り添った化学の教育活動が挙げられる。若い人たちには、地球全体の大きな社会変革の中で日本の存在感を示すことができる研究を目指して欲しいと思う。

なお、本稿で述べた内容の概要は、すでにある雑誌の巻頭言で述べている(化学と教育, 2016, vol 4, 585)。タイトルが同じでちょっと微妙かなと思いつつ、これ以外に座りの良いタイトルが思いつかなかった。そして最後も同じ文章で終わる。人と社会あつての化学である。この事を胸に、これからも化学の教育と研究に取り組みたい。