

## 生体高分子の構造と機能を司る溶媒としての水

オーガナイザー：大森聡

渡辺融

荳口友隆

講師：平田文男

講演者は理論化学の平田文男先生です。先生は現在、分子科学研究所で分子基礎理論を研究されています。この講演では蛋白質のフォールディングにおける溶媒としての水の役割についてお話していただきます。

蛋白質は、そのアミノ酸配列によって決まる固有の3次元構造を持ち、エネルギーレベル最低の立体構造に折りたたまれます。そこでは溶媒としての水が決定的な役割を果たしています。したがって、蛋白質と水の相互作用を明らかにすることが、蛋白質のアミノ酸配列から立体構造を予測したり、構造と機能の相関を解明したりする上での極めて重要なファクターであると言えます。しかし、従来の生体分子の研究では水は物理化学の対象として考えられ、水と生体分子との関わりに対する考察が軽んじられていました。それに対し、平田先生は水と生体分子を同じ分子科学的方法論の基礎に立って扱う理論の確立こそが生命現象の解明という大目標にとって不可欠であると提唱され、水が溶媒として蛋白質のフォールディングに果たす役割について研究されています。

平田先生はこれまでに分子性液体系に対する積分方程式理論である RISM 理論を、部分電荷を持つ体系に拡張し、分子の幾何学的形状と原子上の部分電荷を反映した液体論を完成させるなどの功績を挙げられています。また平田先生は、同じく分子科学研究所で生体分子の計算シミュレーションをされている岡本先生と共同で、生体高分子の水和構造の安定性と立体構造予測について研究されていて、拡張 RISM 理論と拡張 Scaled Particle 理論を用いて、水が蛋白質の構造安定性と機能の双方に支配的な役割を担っているというスタンスから、蛋白質の低温変性の問題に取り組んでおられます。この講演では、蛋白質のフォールディングにおける水やイオンの役割を、化学結合における電子の役割になぞらえてお話いただきます。コンピュータシミュレーションで蛋白質を研究されている方は勿論、実験をされている方で蛋白質のフォールディングの理論的解明に興味を持っている方も是非ご参加ください。