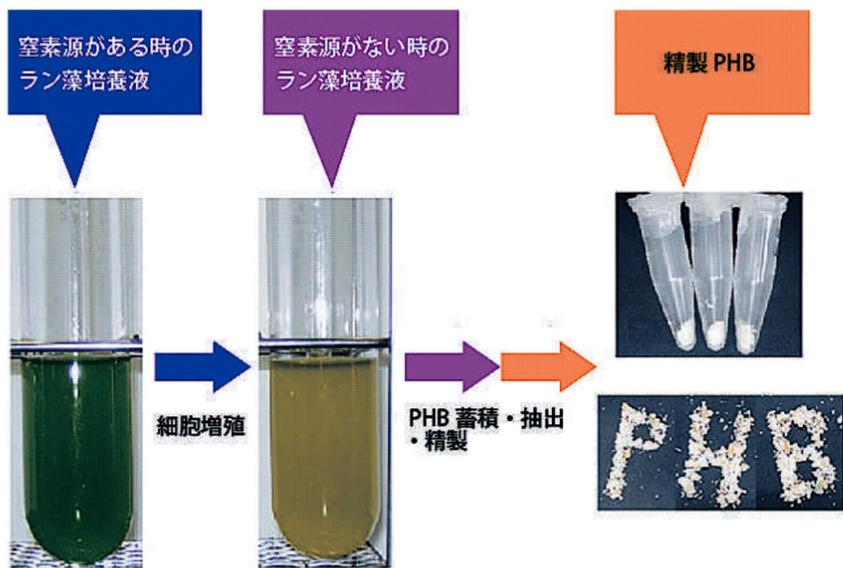


FBI

## 先端技術・社会知創成事業

### ラン藻のバイオプラスチック生産量2.5倍に

バイオプラスチックは、生分解性があり、再生可能な生物資源から生産されるため、環境負荷の少ない材料として注目されている。ただ、代表的なバイオプラ



ラン藻の培養液と精製したポリヒドロキシ酪酸 (PHB)  
ラン藻は、窒素が欠乏すると緑色から黄色に変化する。PHBは窒素欠乏時に細胞内に蓄積される。PHBは、凍結乾燥したラン藻細胞から有機溶媒を用いて、1週間ほどかけて精製・抽出する

●独立行政法人理化学研究所 環境資源科学研究センター  
統合メタボロミクス研究グループ  
代謝システム研究チーム客員研究員  
(科学技術振興機構さきがけ専任研究者)  
小山内 崇

ックであるポリヒドロキシ酪酸 (PHA) は、糖や油脂を原料としているため価格変動の影響を受けやすく、生産コストが化石由来のプラスチックに比べて高いなどの問題を抱えている。

ラン藻は、光と二酸化炭素だけでPHAの一種であるポリヒドロキシ酪酸 (PHB) を合成することができるため、こうした問題を解決できる可能性がある。しかし、その生産量は現在利用されている他の微生物に比べ1桁以上少ない。また、増産のカギとなるPHB合成遺伝子の転写制御機構についても未解明な部分が多かった。

研究チームは、転写制御因子「SigEタンパク質」に着目。遺伝子改変によりラン藻の細胞内でSigEタンパク質量を増やした結果、PHB量が約2.5倍増加した。また、SigEタンパク質の増加によって糖リン酸やクエン酸など、PHB生成経路以外の炭素化合物が増えることも分かり、今後はこれらの副産物の代謝産物を減少させることで、PHBのさらなる増産が期待できる。また、SigEは、炭素の流れを大きく変える因子であることがわかり、PHB以外の物質生産への応用も期待できる。

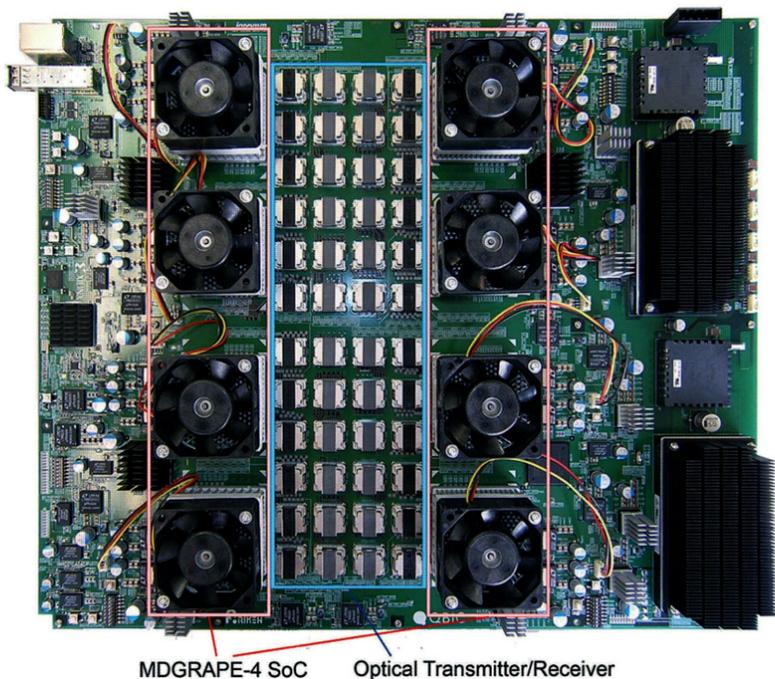
■プロフィール

2002年国際基督教大学教養学部卒。07年東大院農学生命科学研究科修了。農学博士。日本学術振興会特別研究員PD (東大院総合文化) (07~10年)、理化学研究所基礎科学特別研究員 (10~11年) を経て、11年から、JSTさきがけ専任研究者兼理研客員研究員。



### スーパーコンピューターを用いた創薬

2013年度のノーベル化学賞は、タンパク質の運動を物理法則に基づき原子レベルで追跡する手法である「分子動力学シミュレーション」の開発者に与えられた。本



開発中の「MDGRAPE-4」の基板。8個の専用プロセッサ「MDGRAPE-4 SoC」や光ネットワークモジュールなどを搭載している。システム全体では64ボード・512プロセッサとなる

●独立行政法人理化学研究所 生命システム研究センター  
創薬先端計算科学基盤ユニット  
基盤ユニットリーダー 泰地 真弘人

手法はタンパク質と薬剤の結合構造や結合能力の高精度な見積もりなど応用範囲が広く、創薬を行う上でも有効な手法である。計算量の多さから、これまで創薬にシミュレーションを使う例は限定的だったが、京コンピューターをはじめとするスーパーコンピューターの発達により、創薬の分野でもシミュレーション利用が進んでいる。

当ユニットでは、分子動力学シミュレーションを中心に、創薬のプロセスにスーパーコンピューターを活用する手法の開発を進めている。実際に、シミュレーションを行うことによって、安定的に、かつ高精度に薬剤候補化合物の探索が行えることを示してきた。また、ペプチドの設計、量子化学手法の創薬応用といった、大規模なシミュレーションを用いた計算創薬手法の開発を幅広く進めている。

現在、2014年前半の完成を目指し、分子動力学シミュレーションのための専用計算機「MDGRAPE-4」の開発を進めている。創薬に必要なタンパク質の構造変化を追跡するには、1000分の1秒程度の動きまでシミュレーションする必要がある。ところが計算は1000兆分の1秒刻みで行うので、1兆ステップもの計算が必要になる。専用計算機によって通常の計算機の100倍の性能を達成し、こうした長時間のシミュレーションを実現することを目指している。これにより、薬剤が結合する過程や結合後の構造変化など、タンパク質のダイナミックなふるまいを精度よく調べ、創薬に応用することができるようになると期待している。

■プロフィール

1992年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了 (理学博士)。東京大学助手、統計数理研究所准教授を経て、2002年に理化学研究所入所。現在、理研生命システム研究センター副センター長を務める。スーパーコンピューター「京」の創薬への応用、タンパク質シミュレーションの専用計算機の開発を行っている。



#### 理化学研究所と産業界との連携

理化学研究所は、研究成果を社会に普及させ社会知とするためにさまざまな取り組みを行っている。産業界との連携に関する情報や最新の知的財産に関する情報をメールマガジンやウェブサイトを通じて紹介するとともに、技術などに関する相談について随時受け付けている。

■産学連携メールマガジン

産学連携・知的財産に関する情報を月1回程度配

信するメールマガジン。

- ✓ 知的財産情報の新着トピックス紹介 (未公開特許情報を含む)
- ✓ イベント情報 (セミナー・展示会)
- ✓ 理研との連携関係情報 (連携制度の募集紹介など)

[http://www.riken.jp/pr/services/mail\\_collaboration/](http://www.riken.jp/pr/services/mail_collaboration/)

■知的財産情報

未公開特許情報を含む知的財産情報を掲載したウ

ェブページ。技術分野による絞り込みやキーワードによる自由検索が可能。理研との連携や研究成果の技術導入などの検討に活用できる。

<http://www.riken.jp/outreach/ip/>

知的財産・産学連携などに関する問い合わせ  
知的財産・産学連携に関する専用問い合わせフォームがある。技術課題、問題点などの問い合わせが可能。内容によっては「技術指導」として契約の締結が必要になる場合がある。

[https://krs.bz/riken/m/contact\\_renkei](https://krs.bz/riken/m/contact_renkei)