

# 第46回埼玉大学脳科学セミナー

主催：埼玉大学脳科学融合研究センター

## 理論分子科学による生命現象への挑戦

八木 清 先生

理化学研究所・杉田理論分子科学研究室  
研究員

日時：2013年 10月 17日（木曜日）  
16：20 ～ 17：50

場所：理工学研究科大学院国際セミナー室  
（理工学研究科棟7階）

問い合わせ先 高柳 敏幸（内線4961）  
小林 哲也（内線4351）

脳科学融合研究センターは定期的に脳科学セミナーを開催しています。誰でも自由に参加出来るセミナーですので、奮ってご参加下さい。詳しくは下記のHPをご覧ください。

<http://subsi.saitama-u.ac.jp/>

## 要 旨

我々の周りにある全ての物質は、我々のカラダも含め、原子・分子により構成されている。原子・分子は  $10^{-10} \sim 10^{-9}$  m の大きさを持つ極めてミクロな物質であり、我々の住む世界とは全くスケールが異なるため、分子と生命の関係は想像しがたいかもしれない。しかし、近年の分子生物学の発展により、分子レベルの挙動が生体機構に重要な寄与を及ぼすことが分かってきた。例えば、視覚を司るロドプシンというタンパク質は、レチナール分子が可視光吸収により異性化することを利用し、光受容の信号を脳へ伝えている。生体は、分子運動を驚くべき緻密さで制御し、その機能を発現することが明らかになってきている。このような背景から、我々のグループ（杉田理論分子科学研究室）では、原子・分子の解像度で生体系に対する理論シミュレーションを実施している。我々は、分子科学の視点から、生体機構や生命現象を理解することに挑戦している。

本講演では、まず、分子科学的な研究により生命現象の何が分かるのか、どこまで分かるのか、という概観を述べた後、理論シミュレーションの原理と理論・実験のインタープレイがもたらすインパクトを解説する。次に、我々のグループによる最新の研究成果を紹介したい。分子動力学計算による膜タンパクの大規模構造変化や、量子化学計算による振動分光について解説する。