

十一人劇場 第 1 回

『3D プリンタ分子模型を体験する！』

本間善夫 (ecosci.jp, サイエンスカフェにいがた)

1. 画期的な 3D プリンタ分子模型

市民科学研究室により事務所スペースを利用した新企画「十一人劇場」[1]が 2017 年から開催されることになった。同年 5 月 13 日に設定された初回は試行ケースとして何人かが話題提供するのではないかと考え、そのうちの一人として少し話をさせてもらおうと連絡したところ、第 1 回『3D プリンタ分子模型を体験する！』[2]と題して担当させていただくことになってしまった。

1996 年 7 月 31 日に個人で Web サイト「生活環境化学の部屋」(現 ecosci.jp) [3]を開設し、21 年以上化学教育や環境問題のコンテンツを発信し続け、特に目に見えないために嫌われがちな分子や生体分子(タンパク質, DNA・RNA など)をブラウザ上で動かして見ることのできるツール Jmol (現在は残念ながら Internet Explorer でしか動作しない)を用い、自称“分子の宣伝マン”として話題提供を継続してきている。その過程で多数の分子を紹介する書籍(共著)を上梓したり市販書に分子構造画像の元データを提供するなどインターネットの優位性を多々経験し、日本化学連合から「化学コミュニケーション賞 2013」を受賞することにも繋がった。

同賞受賞理由には Web サイト運営に加え科学イベントへの出展実績も含まれており、言わばバーチャルとリアルの双方の活動を評価していただいたものである。後者は 2006 年からお台場で開催されているサイエンスアゴラに 2017 年までの毎回出展(個人から出発し有志出展を経て 2011 年からは所属学会メンバーとして)、2007 年 8 月から新潟市で開催しているサイエンスカフェにいがた[4]、2013 年から日本コンピュータ化学会秋季年会の際に全国各地で開いている一般公開イベント(2017 年 10 月は熊本市で開催)などが含まれている。なお、サイエンスアゴラでは市民科学研究室代表の上田昌文さんほか多くの科学コミュニケーション活動をされている方々に出会うことができた。

さて、そのようなリアルの場で“分子の宣伝マン”として、パソコン画面上のバーチャル分子提示に加え分子の塗り絵や市販分子模型による組み立て体験などで何とか分子の形(構造)の重要性を知ってもらいたいと腐心していたところ、2012 年に北陸先端科学技術大学院大学の川上勝さん(現所属は山形大学工学部)が石膏とシリコーン樹脂による画期的な 3D プリンタ模型(川上モデル[5])を開発されたことを知り、是非その川上モデルで生体分子の説明をしたくなった。本格的な受注を開始していない段階にもかかわらずメールで無理にお願いして、筆者のページで使っている配色での制作を

継続して依頼している。最近では生体分子の全体構造でなく、結合している低分子（リガンドという）やダイヤモンド・金・塩化ナトリウムなどの結晶構造も同様に作ってもらい、多くの来場者に触れてもらっている。科学イベントでの体験後、継続的に学んでもらうには Web ページの存在が有用ということも意識している。

生体分子模型のうち、ヒトのヘモグロビンは高校生物と化学でタンパク質の構造説明で取り上げられており、小分子のヘムの中心にある鉄原子に酸素分子が結合して運ばれること（鉄欠乏性貧血の説明）、4 個のタンパク質が集めた 4 量体であることも教科書に図示されている。川上モデルでは磁石によって 4 量体の組み立て・分解ができ（就学前のこども達にもパズル感覚で組み立ててもらえる）、外周が柔軟なシリコン樹脂でできているため石膏性のヘムが着脱できる（医薬とそれが結合するタンパク質の模型も極めて有用である）ということでタンパク質学習だけでなく研究にも適しており、国内外の研究者からも制作依頼が届いている状況である。なお、ヘモグロビン模型のアミノ酸残基の着色は親水性・疎水性をピンク～緑の濃淡で示す筆者ページの表示と同色になっている。生物種によってアミノ酸配列が異なることは Web ページの方でデータ参照可能である。パソコンの画面は 3D 表示であっても 2 次元画像であるため、3D プリンタ模型で学んでから利用するとわかりやすいという側面もあると考えている。

模型制作に必要な 3D 構造データは Protein Data Bank (PDB, 2017 年 8 月 2 日時点で登録データ数は 132,428 件) [6] から入手でき、分子ツール PyMOL 無料版により色指定して発注すればよい。筆者が現在有しているのはヘモグロビンのほかに視覚を担うロドプシン、



写真 1 川上モデルの例(分子・結晶・リガンド模型のみ)

光合成の光化学系 II に関与する巨大なタンパク質の中にある光化学反応中心の Mn_4CaO_5 クラスタ（“歪んだ椅子”と呼ばれ世界中で研究されている）を含む 1 タンパク質、iPS 細胞研究と関係するタンパク質を含む DNA 複合体（これのみアミノ酸残基は酸性・中性・塩基性で区別）の 4 種である[7]。DNA についても従前は石膏のみで作っていたものをタンパク質同様にシリコン樹脂で覆うように依頼し、二重らせん構造をほどこくことができるために生命の設計図の仕組みに肉薄できる画期的なものとなり、手にした多くの方々から感嘆されている。

タンパク質以外では上記の結晶構造では例えば金では塩化ナトリウムと異なって隣接原子同士で結合があり自由電子や延性・展性の説明に利用できる。これもシリコン樹脂で覆われているため内部の構造が見える上に壊れにくいという利点のためである。

黄鉄鉱（パイライト）の結晶構造と生体内でエネルギー関連のタンパク質によく含まれている種々の鉄硫黄クラスター（PDB から選択）の比較は、生命が深海の熱水噴出孔で鉱物の触媒作用等を利用して誕生したとする説（国立科学博物館で2017年10月1日まで開催中の「深海2017」[8]にも関連展示）の紹介に利用可能である。これは上記“歪んだ椅子”と並んで生物が多く元素を利用していることを理解するには極めて有用で、第1回 十一人劇場以後にモリブデンやタングステンなどあまり耳にしない元素を含むリガンド模型等も入手したことで補強している。これはWeb ページで用いている Jmol が大多数の元素を色で識別できるのをそのまま模型に適用したため、色彩的にも楽しく見てもらえる。現有模型をどのような組み合わせやストーリーで提示していくか（写真1に例）、イベントごとに試行錯誤しつつ“分子の宣伝マン”の役割を果たしていきたいと考えており、その意味でも十一人劇場という得難い機会を与えてもらったことに感謝しているところである（当日の会場準備中が写真2）。



写真2 第1回 十一人劇場の会場準備(右下にヘモグロビンなど川上モデル生体分子の例)

なお、川上モデルは高価なフルカラー3D プリンタを利用していること、生体分子データごとに模型制作の技術的チェックなどが必要なことなどが理由で現在では高価であるが、高校の教材として地域で一括発注すれば価格が下がるとも思われ、模型の存在を広く知ってもらう意味で各地の公開イベントで紹介しているほか、筆者による出前講座も受け付けている[7]。

2. 分子を通じてビッグヒストリー／統合学を学ぼう

地球上の生物が多様な元素を利用している事実を、生命誕生あるいは地球・元素・宇宙の誕生にまで遡って考えることは、現在の科学の存在の意味を問う意味でも重要である。そのことを人間社会の誕生や変遷まで含め、国内外で注目されるようになってきたビッグヒストリーというプラットフォームを利用して学び合うことの意義についても十一人劇場で簡単に紹介させてもらった。2016年のサイエンスアゴラ出展[9]でビッグヒストリーのテキスト日本語版『ビッグヒストリー：われわれはどこから来て、どこへ行くのか』[10]を翻訳監修された長沼毅さんをトークセッションにお招きしたこともあり、筆者自身が関心のある領域に引き付けてビッグヒストリーについて考え続け Web で発信したい[11]。

さらに2017年7月に発刊された池田善昭・福岡伸一『福岡伸一、西田哲学を読む 生命をめぐる思索の旅 動的平衡と絶対矛盾的自己同一』[12]において、福岡伸一さんの動的平衡論による生命科学と西田哲学における生命観との関係が論じられ、ビッグヒストリー同様に文系理系の壁を越えるべきと

する統合学の役割が語られている。写真 1 中のカード『伝える／動かす／包む』（遺伝／エネルギー／細胞・小器官）は同書に触発されたものである[13]。

市民科学というものを広めていく上でもビッグヒストリーや統合学という発想は有用なヒントを与えてくれるのではないかと浅慮しているところであり、今後幅広い分野の方々と議論していくことができたらと考えている。その過程で手に触れられる分子模型群が何らかの役割を果たしていくことができたらうれしく思う。

参考文献・Web ページ

- [1] 十一人劇場（市民科学研究室），<http://www.shiminkagaku.org/20300020170403/>.
- [2] 同 第 1 回（市民科学研究室），<http://www.shiminkagaku.org/20100020170427/>.
- [3] 本間善夫，<http://www.ecosci.jp/>.
- [4] サイエンスカフェにいがた，<http://www.ecosci.jp/n-cafe/>.
- [5] たとえば，川上勝，https://www.jstage.jst.go.jp/article/biophys/55/2/55_104/_pdf.
- [6] RCSB PDB，<https://www.rcsb.org/>. ※PDBe（欧州），PDBj（日本）でも同データ管理.
- [7] 本間善夫，<http://www.ecosci.jp/m/>.
- [8] 深海 2017，<http://shinkai2017.jp/>.
- [9] 日本コンピュータ化学会@サイエンスアゴラ 2016，http://www.ecosci.jp/sccj_sa2016/.
- [10] デヴィッド・クリスチャンほか著・長沼毅（日本語版監修）『ビッグヒストリー：われわれはどこから来て、どこへ行くのか』明石書店（2016 年）.
- [11] 本間善夫，<http://www.ecosci.jp/BigHistory/>. ※ビッグヒストリーは国内外の講義でも活用されている。
- [12] 池田善昭・福岡伸一『福岡伸一、西田哲学を読む 生命をめぐる思索の旅 動的平衡と絶対矛盾的自己同一』明石書店（2017 年）.
- [13] 本間善夫，<http://www.ecosci.jp/chem13/topics16a.html#03>.