

10月19日付研究成果発表「タンパク質設計問題を解決する数学公式を発見～圧倒的に高速な設計により、創薬・新素材・新デバイス開発への応用が期待～」について

国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学大学院情報学研究科の高橋 智栄 博士後期課程学生（JST 融合フロンティア次世代リサーチャー）、時田 恵一郎 教授、大学院工学研究科の千見寺 浄慈 助教らの研究グループは、2022年10月19日に研究成果「タンパク質設計問題を解決する数学公式を発見～圧倒的に高速な設計により、創薬・新素材・新デバイス開発への応用が期待～」を発表したところです。

しかしながら、この内容について、主にソーシャルメディア上において、専門家の方からプレスリリースのタイトルと内容に誇大な表現が含まれている、説明不足であると指摘するコメントが寄せられ、また、一般の方に対しても、本研究が実際に達成したこと以上の成果を含むかのような誤解を招く事態となったため、以下のとおり補足説明します。

1. 一般の方への補足事項

- ・本研究は、タンパク質設計問題が持つ困難の本質的な部分を解決するものと考えていますが、今のところ本物のタンパク質をかなり単純化したモデルを用いた検証しかしていないので、本研究の方法を用いることにより現実のタンパク質の高速設計がすぐに可能になるというわけではありません。
- ・現実のタンパク質を設計するためにはさらなる研究が必要です。

2. 研究者の方への補足事項

- ・本研究は、タンパク質の主鎖構造を入力としたときに、その構造を熱力学的に安定にする（親水性と疎水性の2種類に分類したいわゆるHPモデルの）アミノ酸配列を（サンプリングやシミュレーションなしに）高速に推定する新しい方法を提案するものです。
- ・各アミノ酸残基の側鎖の自由度やパッキングの効果はモデルに含まれていません。
- ・本研究の方法は、各アミノ酸残基間のコンタクトネットワークを入力とするため、2次元モデルにのみ適用可能というわけではなく、3次元モデルにも適用可能です。実際、答え合わせが可能なサイズ（ $N=3 \times 3 \times 3$ ）の3次元モデルについても設計が成功することは確認しています。
- ・本研究の方法は、各アミノ酸残基間のコンタクトネットワークを入力とするため、格子モデルにのみ適用可能というわけではなく、off-latticeモデルにも適用可能です。ただし、リゾチームなどの現実に存在するタンパク質の主鎖構造を用いた「再設計」を行ったところでは、リゾチームの配列をHPに変換した配列との一致度は60%程度に留まっています。これについては、モデルをより現実的なものにすることで改善できないか研究中です。