

原子で情報をつくり，表現する



研究ノート

宮田 幹二*

Creation and Expression of Molecular Information

Key Words : Information, Expression, Carbon-chain, Recognition, Steroids

1. はじめに

宇宙の誕生から現在までの歴史を化学者の立場から鳥瞰したいと思い始めてからもう十年以上過ぎたであろう。この間、非決定論的宇宙観を知った時の衝撃が忘れられない。人類の歴史と同じように、この宇宙の歴史も偶然と必然の絡んだ選択枝の一つを示しているに過ぎない。このような自由度に富む考え方に立つと、化学の分野で案外語られていないことがあるのに気づいた。その一つが分子と情報との関係である。私達はステロイド分子を用いてこの関係を調べ、分子情報と表現に関する概念を従来より拡張することができた。ここでは、この研究における考え方を簡潔に述べたい。

2. 従来の考え方を拡張する

従来、化学では原子をつなげば分子ができる、生物学ではその分子の中で核酸やタンパク質が情報を担っている、という考え方が知られている。この考えは、情報を担う物質を非常に限定

している。これらの物質に限らずもっと広く、原子をつないで分子にすれば一般的に情報をつくれるという概念が成立しないだろうか。

思いついたのは、分子情報の表現を広く解釈すればこの概念は成立し得る、ということである。つまり、核酸の二重らせんやタンパク質の折り畳み構造以外にも、情報の表現形式があると考えればよいのである。では一体、どんな分子を用いればどんな表現形式があるのか。

この問題を考える時に、分子と言語とを対比させると貴重な示唆が得られた。例えば、{あいうえお…}の組合せの数は無限であるが、国語辞書をみると有限の組合せしかのっていない。これと同じく、原子の組合せとしての分子は無限種であるが、意味ある分子は有限であろう。また、日本語には、長編小説や短編小説に加えて、日本文学の特徴として短歌や俳句がある。前者に相当するのはもちろん核酸・タンパク質であろうが、後者に相当するのはどんな分子であろうか。というような具合にである。

3. 炭素原子から情報をつくる

私達は、例えば日本語なら {あいうえお…} などのひらがなを、英語なら {A B C…} などのアルファベットを、コンピュータ言語なら {0, 1} の数字を要素とし、これらを並べて情報をつくる。同様なことを原子をつなげて行えばよいだろう。

原子の中で例えば、炭素原子を使う(図1(a)). 炭素原子は互いに空間的に方向の異なる四つの手をもつ。このうち二つの手を炭素同士の結合

*Mikiji MIYATA
1948年4月26日生
1973年大阪大学大学院工学研究科
石油化学専攻修士課程修了
現在、大阪大学大学院工学研究科、
物質・生命工学専攻、教授、工学
博士、分子認識化学、高分子、超
分子
TEL 06-879-7406
FAX 06-879-7404
E-Mail miyata@ap.chem.eng.
osaka-u.ac.jp



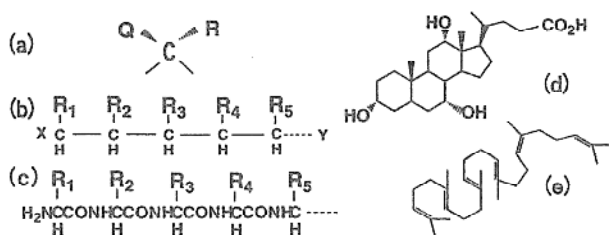


図1 原子から情報を作る。(a)炭素原子と四つの手；(b)炭素原子の鎖；(c)アミド結合をもつタンパク質；(d)胆汁酸ステロイドのコール酸；(e)スクワレン。

に使い、残りの二つ(Q, R)に様々なもの、例えば、片方(Q)に水素(H)、他方(R)に、メチル基(CH₃)をつければ、情報の要素となる。メチル基をエチル基(CH₂CH₃)、水酸基(OH)などに変えれば一群の要素ができる。これらの要素を並べて鎖にし、両末端に異なるもの(X, Y)をつけて鎖の方向性を決めれば、情報ができあがる(図1(b))。

簡単に聞こえるが、実は問題点がある。二つの手(Q, R)を区別して正確に情報要素をつくるのがむずかしいのである。さらに、情報要素を意図的に順番に並べて、短い鎖ならまだしも長い鎖をつくるのは、現代の合成化学では非常に困難である。

4. 情報表現と分子認識

私達は音声や映像などにより情報を表現する。一方、分子は物理的な力、すなわち電磁気力を使って情報を表現するしかないはずである。分子にとって、この力が関係する結合には大きく分けて二つある。結合エネルギーが100 kcal/mol前後で原子をつないで分子をつくる共有結合と、10 kcal/mol前後で分子をつないで分子集合体をつくる非共有結合(水素結合やファン

デアワールス力などの弱い分子間力)である。情報の観点からは、前者は情報の作成に使われ、後者は情報の表現に使われると考えればよいだろう。

炭素原子からなる鎖状の分子は、つぎのように情報を表現すると考えられる(図2)。まず、分子の鎖から建築物がつくられる。この建築物にすき間が生じると、言い換えれば、入れ物があると、他の分子がここに入ることができる。この際、無限種の分子のなかで限られたものだけが取り込まれる。これが分子の世界の認識である。この認識に基づいて、異なる分子の集団が形成されていく。

この表現の際に、二つの問題点がある。その一つは、炭素がつながった鎖では原子間で非常に速い回転が起こり、建築物が目まぐるしく変化することである。そのため、すき間が変幻自在に変化してしまう。もう一つは、分子は運動しているため、入れ物より小さい分子は入れ物からすり抜けていくことである。

5. 情報の観点から意味のある分子

国語辞書にのるような、情報の観点から意味のある分子は、第3節と第4節で述べた問題点を克服する分子である。つまり、(1)炭素の四つの手と鎖の長さを正確に決めている、(2)安定な建築物をつくり、異なる分子を捕まえる分子である。

このためには、水素結合などの非共有結合を多数使って分子間力を大きくする必要がある。つまり、酸素や窒素などの原子を多数含む分子がよい。このように考えると、タンパク質(図1(c))が巧くできている。炭素原子間にアミド基(CONH)を入れて、四つの手と鎖の長さを決めるとともに多数の水素結合を使えるようにしている。図2(a)のように、タンパク質の分子情報は鎖の折り畳みを通して表現される。

このアミド結合を無くして炭素鎖(図1(b))をつくるのは、残念ながら現在の合成法では実現できない。ところが幸いなことに、同等な意義をもつ分子として、胆汁酸ステロイド(図1(d))が存在する。これはもともとスクワレン(図1(e))を環化したものである。鎖の炭素数

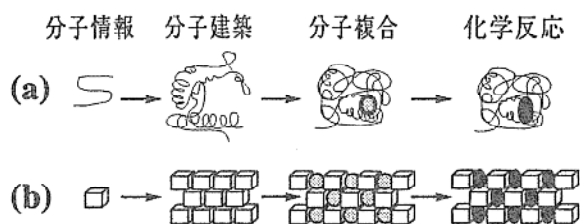


図2 分子情報の表現形式。(a)タンパク質の場合；(b)ステロイドの場合。

は二十を少し越えるぐらい、まさに短歌や俳句ぐらいである。

6. 情報担体としての胆汁酸ステロイド

胆汁酸ステロイドでは、多環のため鎖の動きが止められ、複数の水素結合基により分子間力も大きい。さらに、この分子の立体構造(図3(a))をよくよく眺めていると、まるで脊椎動物のように思えてくる(図3(b))。というのは、この分子は骨格と側鎖からなり、頭尾・左右・背腹の三方向を区別できるからである。しかも、首のように骨格は曲がり、複数の水素結合基は目や手、側鎖は尾のようである。

情報表現に関しては、タンパク質とは異なる表現形式、すなわち分子の集合を通して情報が表現されると考える(図2(b))。分子の集合様式は、ステロイドのように非対称な分子の場合、非常に多種類になる。従って、研究の具体的目標は、分子集合様式とすき間に取り込まれる分子の種類と範囲とを実験的に決定し、これらの実験結果を理論的に説明、さらに予測することである。

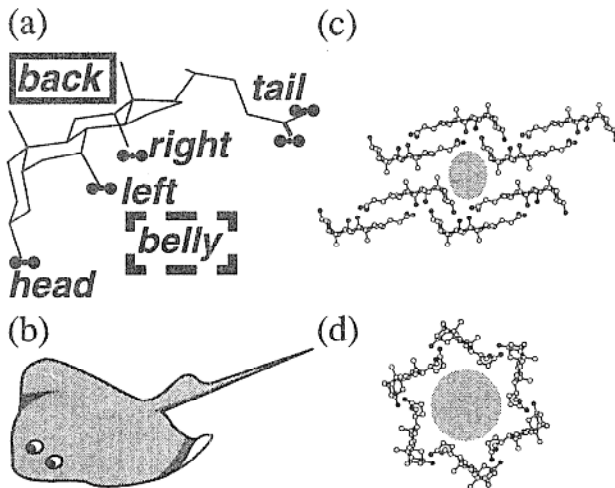


図3 胆汁酸ステロイド分子の立体構造と集合様式。
(a)立体構造；(b)脊椎動物との類似性；
(c)層状集合；(d)らせん柱状集合。

例えば、層状(図3(c))やらせん柱状(図3(d))の分子集合様式があり、各々の集合様式に取り込まれる分子が確定される。このような事例を収集するのにすでに十年の歳月をかけたが、そろそろ整理して理論的説明と予測に熱意を注ぐ時であろうか。

7. おわりに

現在の技術は、ほとんど人間の意志で物質を認識することに基づいている。これに対し、物質間の認識を物質自身で自動的に行わせることを必要とする技術が生まれるなら、分子認識はその技術の根幹となるであろう。マイクロマシンなどはその萌芽であろうか。細胞の中では、数万種の分子が互いに認識しながらナノマシンを築き、動かしている。

参考文献

- 1) M. Miyata, M. Shibakami, S. Chirachanchai, K. Takemoto, N. Kasai, and K. Miki, *Nature*, **343**, 446 (1990).
- 2) 宮田幹二, *生物物理*, **32**, 182(1992); *日本化学会誌*, 1993, 128.
- 3) M. Miyata, "New Macromolecular Architecture and Functions (OUMS'95)", ed. by M. Kamachi and A. Nakamura, pp.21-30 (1996, Springer, Berlin).
- 4) M. Miyata and K.Sada. "Comprehensive Supramolecular Chemistry", Vol.6, *Solid State Supramolecular Chemistry: Crystal Engineering*, ed. by D. D. MacNicol, F. Toda and R. Bishop, pp.147-176 (1996, Pergamon, Oxford)
- 5) 宮田幹二, "分子認識化学—超分子へのアプローチ" 築部浩編著, pp.69-98(1997, 三共出版, 東京)