

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	澤田敏樹
研究機関名	東京工業大学
所属部署名	物質理工学院
役職名	准教授
研究課題名	繊維状ウイルスの合目的配列制御に基づく機能物性創発
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

主にタンパク質からなる繊維状ウイルスを素材とし、それらを規則的に集合化させた集合体の機能物性を遺伝子改変と機械学習に基づき合目的的に制御することを目指した。ファージ表層のアミノ酸を簡便かつ自在に改変できる新たな逆クローニング PCR 法を確立し、表層にジペプチドを提示したライブラリーを構築した。構築したライブラリーに含まれる数十種のファージクローンそれぞれからなる集合体の熱拡散率を測定した。それらを訓練データとし、適切なアルゴリズムや記述子を選択して遺伝子改変により提示したジペプチドのアミノ酸配列が熱拡散率に与える効果を予測可能なモデルを構築した。その結果、熱拡散率を適切に予測することができ、野生型ファージを用いた場合と比較してはるかに高い熱拡散率を示す集合体を構築できることが実験的に明らかとなった。さらなる詳細な構造解析の結果、規則的な集合構造が形成されていることが明らかとなり、これまでの知見と良い一致を示した。さらに予測モデルの可視化を検討した結果、高熱伝導化に寄与するアミノ酸の記述子を明らかにすることができ、さらなる高熱伝導化に向けたライブラリーの設計指針の確立に繋がるものと期待される。

また、他の機能物性としてイオンを金属へと還元するバイオミネラリゼーション能に着目し、同様のアプローチによる合目的なファージ表層のアミノ酸配列の改変を検討した結果、確かに様々な金属イオンのミネラリゼーション能の予測が可能であり、ファージ分子あるいはその集合体の機能物性を指標とした合目的な配列制御が一般に可能であることを見いだした。