

## Artificial Chemistry: Computational Studies on the Emergence of Self-Reproducing Units

人工化学進化のモデル：自己複製構造の創発の  
計算機シミュレーション

Naoaki ONO  
小野直亮

地球上の生命の起原の問題については、近年の分子生物学の知見をもとにして、RNA 代謝系起源説、タンパク質代謝系起源説、脂質代謝系起源説などの仮説が提案され、様々な実験によって検証されてきているが、まだまだ決定的な結論を出すには到っていない。その一方で、生命とはなにか、について、個々の構成分子の性質を詳細に調べるよりも、全体のシステムがどのように振る舞うかに注目し、考えていこうというアプローチが存在する。その中で、生命を特徴付けるもっとも重要な性質の一つである進化可能性、そしてその進化可能性の基盤となる自己複製の能力について、その本質を捕らえ、その発生と進化の過程を議論するための様々なモデルが提案されてきた。

自己複製分子の起源と並んで生命の発生と進化にとって不可欠なイベントは細胞の起原である。我々は原始細胞の起源とその役割を考えるため、単なる境界条件としての細胞膜ではなく、内側に閉じ込められた自己触媒反応によって動的に代謝され、維持される構造としての細胞膜を持つ細胞のモデルを構成し、その振舞いをシミュレーションした。

まず一つ目のモデルでは、細胞膜の形成をシミュレーションするために、二次元空間上をブラウン運動する粒子のダイナミクスを考える。粒子の種類に疎水性、親水性、中性のものがああり、それぞれ異なる強さで反発し合うことを考える。細胞膜を構成する両親媒性の分子は、バネでつながれた疎水性、親水性の二つの粒子として表現される。分子同士の反発により、二重層からなる膜が自発的に形成され、膜胞を作る (図 1a)。

次に、分子の確率的な化学反応を導入する。膜分子を代謝することのできる自己触媒系を考え、膜胞の中に閉じ込めることによって、自己維持的な細胞構造をモデル化することができる

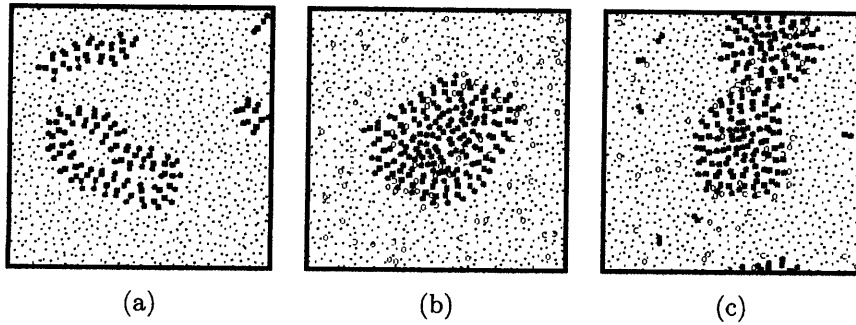


図 1: 細胞形成のモデル。(a) 膜の自己組織化。(b) 代謝系を持つ細胞。(c) 細胞の分裂。

(図 1b)。代謝のリソースとなる粒子は、系の外部から一定の速さで供給され続けていると仮定している。リソース粒子が細胞膜をある程度透過できることを仮定すると、細胞はリソースを吸収しながら成長することができる。細胞の成長と膜の成長がずれ、膜の成長が速い場合、細胞の内外の圧力差によって細胞の形が変化してゆき、最終的には自発的な分裂が起こることが示された (図 1c)。

次に、より長いタイムスケールでのダイナミクスを考えるために、粒子の振舞いをより単純化したもう一つのモデルをシミュレーションした。このモデルでは粒子の運動は離散格子上的ランダムウォークでモデル化されている。一つ目のモデルと同様に分子の疎水性相互作用と、自己触媒サイクルによる代謝を導入することで、細胞の成長と自発的な分裂が示された。

また、図 2 では、特別な構造のない様な初期条件からの発展を示す。この場合、膜の持つ半透性から、分子の浸透によって空間的に一様な状態が不安定化し、リソースが特定の領域に集中するようになる。その結果、原始細胞に相当する構造が自発的に形成されてくることが示された。また、このリソースの集中の効果により細胞を作るような自己触媒系が進化的に有利になり得ることがわかった。これらの結果は、前細胞的な化学進化の中から原始的な細胞が進化的に発生してくるシナリオを示唆していると言える。

今後の課題としては、代謝系に遺伝的な変異を許し、細胞がどのように進化してゆくかを調べることなどが考えられる。

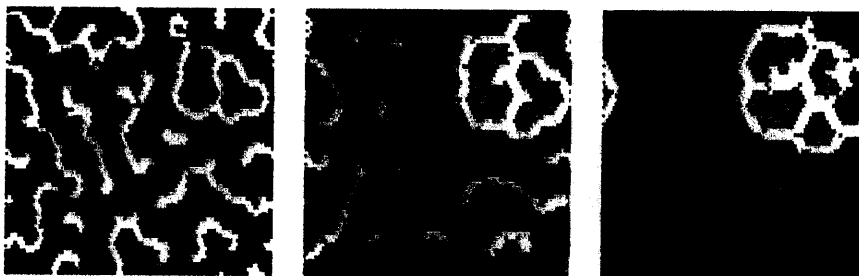


図 2: 一様な初期条件からの細胞の創発。左から  $t=30000, 120000, 180000$ 。