2R3-03

仮想空間を活用した研究ツールの 教育的利用の検討

依田 ひろみ、井上 哲理、高村 岳樹、小池 あゆみ

神奈川工科大学

発表資料を公開用に一部改訂

- 創薬研究支援のため、研究者・専門家向けにフィアラックス社と本学がモルコラボ改良版を共同開発
- デモ版を体験した学生にも好評であったことからタンパク質分子構造の教育ツールとしても利用を検討

バーチャルリアリティーを利用したタンパク質の見える化と直感的創薬デザイン
/神奈川工科大学 研究推進機構
YouTubeチャンネル

生物の教科書に登場する生体分子 – PDBで見る–

3部 遺伝情報の発現

20世紀後半の生物学の進歩により、私たちは遺伝子を操作することが可能となった。今では、その技術は医療などのさまざまな分野で活用されている。遺伝子の本体であるDNAは、どのような物質で、どのように組んでいるのだろうか。

1 DNA

A DNAの構造

DNAは、生物の遺伝情報を担う分子である。DNAは、リン酸と糖(デオキシリボース)と塩基からなるヌクレオチドが連なったヌクレオチド鎖で構成される。

DNAを構成する塩基には、アデニン(A)、チミン(T)、グアニン(G)、シトシン(C)の4種類がある。このとき、AとT、GとCは、それぞれ特異的に結合する。AとT、GとCの組合せによりつくられる対を塩基対(相補的塩基対)という。

DNAを構成する塩基には、アデニン(A)、チミン(T)、グアニン(G)、シトシン(C)の4種類がある。このとき、AとT、GとCは、それぞれ特異的に結合する。AとT、GとCの組合せによりつくられる対を塩基対(相補的塩基対)という。

①図1 ヌクレオチドの構造

②図2 DNAを構成する塩基

③図3 DNAの構造

④図4 ヌクレオチドどうしの結合

⑤図5 ヌクレオチド鎖の方向性

<生物 新訂版/実務出版>

PDB ID: 1bna

平面図ではDNA塩基配列の立体的ならせん状構造を想像しにくい

エネルギー物質を作り出すATP合成酵素は、いくつものタンパク質分子が集合した複合体になることでようやく機能する

PDB ID: 1c17

高校生物の教科書に登場する生体分子はPDB(タンパク質データベース)に登録されており、PDBのWebサイトは誰もが構造データにアクセスできる。

タンパク質分子VR表示システムの教育的利用

タンパク質を見る

タンパク質分子構造

PDBデータ

CGツール

PDBデータはPC用分子構造表示ソフトウェアで見られるが、教科書に似て平面的に見える

PyMol

UCSF
ChimeraX

仮想空間表示

VR(バーチャルリアリティ)

データ変換
空間表示プログラム

+

HMD

コントローラー

直感的に捉える
仕組み

ハンドモデル

VRならではの機能

複数人で共有

VR空間を共有するメタベースでタンパク質分子の授業が可能

もともと研究用途だから分子の解析機能が付いている

増田恵, 井上哲理, 上平員丈, 棚橋航, 小池あゆみ, タンパク質構造データベースから分子構造を仮想空間で可視化する技術の開発, トーゴの日シンポジウム 2019 より引用、一部改変

VR表示システムの体験者アンケートの実施

協力者： 大学生, 大学院生, 中高生, 社会人(保護者)

HMD: Meta Quest 2, 3 (安全のため、背景が見えるMR複合現実モード)

VRアプリケーション: MolCollabo, Nanome

- 日本語表示
- PDBデータはすべてダウンロード可
- 分子に触れるとコントローラーが振動
- アミノ酸名と番号をポップアップ
- ライセンス版 (30日間の無償版あり)

- 海外製のため英語表示
- 機能はMolCollaboと類似
- コントローラーの振動なし
- デモンストレーション版(無償)あり

2024年度 女性研究者奨励金 (日本私立学校振興・共済事業団)の支援を受けて実施

神奈川工科大学ヒト倫理審査委員会 承認番号第20241122-02

高性能HMDによるタンパク質分子のVR表示

(1) 大学生・大学院生はタンパク質分子のどこを見ていたか？

アミノ酸番号を一部表示させている
SARS-CoV-2の主要プロテアーゼ
(PDB ID: 6LU7)

大学生のVR体験の様子

バイオ系学科の大学生(初学者) 協力者12名

	はい(%)	いいえ(%)
VRを体験したことがある	38	62
PDBを知っている	0	100
パソコン表示より記憶に残るか	100	0

一部のアミノ酸番号に気づいたか

タンパク質分子の構造を見慣れない大学生は、全体の形状を見ており、分子表面や相互作用を担うアミノ酸は見落としていることがわかった

高性能HMDによるタンパク質分子のVR表示

(1) 大学生・大学院生はタンパク質分子のどこを見ていたか？

リボソームの全体像
(緑色はタンパク質部分)

リボソームタンパク質L9の
アミノ末端付近の構造
(PDB ID: 2HBA)

バイオ系大学院生(エキスパート) 協力者3名

タンパク質L9分子がリボソームRNAと接している部位は
どこか？という課題を与え、VR観察中の視界を録画し、
1秒ごとの視野を以下の3つに分類

機能を変更する

分子を見る

分子に触れる

大学院生の視野の割合

	機能変更(%)	見る(%)	触れる(%)
学生A	31	17	51
学生B	19	13	69
学生C	53	16	31
平均	34	15	50

タンパク質のアミノ酸側鎖の重要性を知る大学院生は、分子表面の
アミノ酸の種類や形状を観察するために、観察時間の半数以上を
分子構造の回転に費やしていた。

高性能HMDによるタンパク質分子のVR表示

(2) 初学者がタンパク質分子を見やすいと思う条件はどれか？

本学のMolCollabo体験会にて、いずれかのタンパク質分子のPDBデータを観察してもらい、VR体験後に意見を寄せてもらった(協力者:中高生 約30名、社会人 約70名)

	はい(%)		いいえ(%)		無回答(%)	
	社会人	中高生	社会人	中高生	社会人	中高生
VR体験がある	55	53	45	47	-	-
パソコンより分かりやすい	96	90	1	0	3	10
分子の立体構造の重要性が分かった	93	89	4	0	3	11

MolCollabo体験後の情報科学・生物科学に対する興味

VRの体験や理解に年代差は見られないが、社会人は情報科学に興味を示し、中高生は生物科学に興味を示す傾向だった。中高生はまだ見ぬ大学レベルの生物学に期待を寄せらていると受け取ることができる。

高性能HMDによるタンパク質分子のVR表示

(2) 初学者がタンパク質分子を見やすいと思う条件はどれか？

タンパク質の立体構造を集中して見ることができるのはどれか

中学生・大学生の多くが、PCや教科書よりも仮想空間のほうがタンパク質分子の構造を理解しやすいと答え、半数は背景が三次元CGで覆われた没入感の高いVR環境での観察を希望していることがわかった

結論

- 中高生～社会人まで、VR表示システムはタンパク質分子の立体構造を理解しやすい
- 学生・生徒は、周囲が見えない三次元CGのVR空間のほうが学習に没頭できると期待している

HMDは、タンパク質分子の立体構造の理解を補助するだけでなく、映像教材を視聴する集中力を引き出す可能性がある。

今後の予定

- VR空間を用いた学習の教育効果の判定方法を確立する。
- VR表示システムのスマートフォンアプリ化を目指し、身近な教材となるよう利便性を高めたい。

神奈川工科大学 研究推進機構 研究広報部門
住所：〒243-0292 神奈川県厚木市下荻野1030
TEL：046-291-3277 / FAX：046-291-3221
<https://www.kait.jp/inquiry/>

謝辞

株式会社フィアラックス様には、ソフトウェア開発において多大なご協力を賜りましたことを感謝申し上げます。

本研究の一部は、文部科学省私立大学戦略的創造研究推進事業の助成を受けて行われました。

(事業番号:S1511019L、研究代表者:小池あゆみ)

VR体験アンケート調査は、日本私立学校振興・共済事業団2024年度 女性研究者奨励金の支援を受けて行われました。