

科学研究費助成事業（基盤研究（S））中間評価

課題番号	19H05645	研究期間	令和元(2019)年度 ～令和5(2023)年度
研究課題名	マルチスケール分子動力学シミュレーションによる細胞内分子動態の解明	研究代表者 (所属・職) (令和3年3月現在)	杉田 有治 (国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員)

【令和3(2021)年度 中間評価結果】

評価	評価基準	
	A+	想定を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
○	A	順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である
<p>(研究の概要)</p> <p>本研究は、細胞内の化学反応から細胞内分子混雑状態での蛋白質複合体の挙動まで、広い時空間をシームレスに接続するマルチスケール分子動力学シミュレーションシステムを構築し、細胞内環境が酵素反応に与える影響や蛋白質の構造柔軟性と液液相分離の関係など、細胞内における蛋白質分子動態の解明を目指すものである。</p>		
<p>(意見等)</p> <p>本研究は、分子動力学のための超並列計算プラットフォーム GENESIS に QM/MM 法、粗視化 MD 法を統合し、複数の階層 (QM、全原子、粗視化) を接続するマルチスケール計算法を開発して、液液相分離など分子から細胞までの現象を理論、実験の両方により検証しようとするものである。</p> <p>高速量子化学プログラム QSimulate をライブラリーとして GENESIS から直接呼び出すことにより QM/MM 計算の高速化を実現し、蛋白質だけでなく DNA や RNA、天然変性蛋白質の計算を可能にする粗視化 MD 計算の実装を行うとともに、マルチスケール計算によって酵素複合体 TRPS の構造変化と反応の研究を行うなど研究成果を上げており、研究は順調に進展している。こうして整備された計算法によって、多階層にまたがる細胞内分子動態を解明する課題に向けた今後の進展が期待できる。</p> <p>一方、実験による検証は本研究の大きな特徴の一つであるが、新型コロナウイルス感染症の影響もあり必ずしも順調に進んでいるとは言えず、今後の展開に期待する。</p>		