

科学研究費助成事業（基盤研究（S））中間評価

課題番号	18H05264	研究期間	平成30(2018)年度 ～令和4(2022)年度
研究課題名	光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる偏在プロトンの機能解明	研究代表者 (所属・職) (令和2年3月現在)	中井 浩巳 (早稲田大学・理工学術院・教授)

【令和2(2020)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>(意見等)</p> <p>本研究は、光受容タンパク質を量子的に取り扱い、偏在プロトンの観点から、生命現象の微視的機構を解明することを目的としている。</p> <p>研究代表者らは、当初の計画どおり、独自に開発した分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) 法を GPU アクセラレータに対応させることにより、更なる大規模化・高速化を達成している。また、本手法を用いて、バクテリオロドプシンのプロトン移動ダイナミクスや光活性イエロータンパク質の励起エネルギー計算を始めとする応用研究への展開も行っており、着実な研究成果を上げている。さらに、開発したプログラム DC-DFTB-MD 法を公開し、世界的に使用されている点も評価できる。今後、計算手法の更なる有用性を実証するため、実験系の研究者（結晶構造科学者）との共同研究を積極的に進め、実際のタンパク質とのマッチングを図ることが期待される。</p>		