

科学研究費助成事業（基盤研究（S））事後評価

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遍在プロトンの機能解明	研究代表者 (所属・職) (令和5年3月現在)	中井 浩巳 (早稲田大学・理工学術院・教授)

【令和5(2023)年度 事後評価結果】

評価	評価基準	
	A+	期待以上の成果があった
○	A	期待どおりの成果があった
	A-	一部十分ではなかったが、概ね期待どおりの成果があった
	B	十分ではなかったが一応の成果があった
	C	期待された成果が上がらなかった
(研究の概要)		
<p>生体分子系においてプロトンは多様な形態で遍在し（遍在プロトン）、周囲の構造や電子状態の変化に伴って複雑な動態を示す。その結果として生じるプロトン移動は、生命現象において重要な寄与を果たす。本研究では、生体分子系全体を量子的に取り扱うための基盤技術の開発と、光受容タンパク質を対象とした応用を実施し、生命現象の微視的機構を遍在プロトンの観点から解明することを目指している。</p>		
(意見等)		
<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高速化し、長時間の量子論的MDシミュレーションを可能とする手法を確立した。また、大規模系に対する励起状態シミュレーション法の開発と電子状態間遷移を伴うダイナミクスを扱う方法論の導入も実現している。その上でこれらの計算手法を用いて、また、タンパク質構造解析の実験研究グループとの連携も図りながら、バクテリオロドプシンやイオン輸送機能を持つ微生物型ロドプシンにおけるプロトン移動ダイナミクス・FoF1-ATP合成酵素における機能発現ダイナミクス・光活性イエロータンパク質における光異性化ダイナミクス・バクテリオロドプシンの光異性化ダイナミクスの解明に取り組み、実験研究のみでは明らかにすることが困難な微視的機構の詳細に踏み込んだ描像を与えることに成功した。さらに、新たな展開として、喫緊の課題となった新型コロナウイルス感染症対策に関連してSARS-CoV-2メインプロテアーゼにおけるプロトン移動ダイナミクスの理論研究にも取り組み、新規薬剤候補を見いだしている。以上を総括すると、期待どおりの着実な成果を上げた」と評価される。</p>		