

科学研究費助成事業（基盤研究（S））事後評価

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6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6(2024)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
<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>研究代表者らが独自に開発している分子動力学計算ソフトウェア GENESIS に、全原子分子動力学(AAMD)に加え、粗視化 MD (CGMD)と量子力学/分子力学混合計算(QM/MM)を組み合わせたマルチスケール MD 計算法を開発して導入し、その高速化を図った。これを様々な酵素系や液液相分離系に適用し、成果を得た。特に本研究では、「細胞内分子混雑環境における酵素反応」と「タンパク質の構造柔軟性と液液相分離の関係」に焦点を当て、理論と実験の両方からのアプローチにより、いくつかの重要な成果を得た。開発された計算ソフトウェアを一般に公開し、この分野の発展に貢献したことは評価に値する。</p>		