

## 令和元(2019)年度 基盤研究（S） 審査結果の所見

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	杉田 有治 (理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員) ※令和元(2019)年7月末現在
研究期間	令和元(2019)年度～令和5(2023)年度
科学研究費委員会審査・評価第二部会における所見	<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タンパク質複合体の挙動までの広い時空間を、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の構築を目指すものである。</p> <p>応募者は、バクテリア細胞質の全原子分子動力学シミュレーションなどで当該分野をリードしている研究者である。本研究は、自身が開発した超並列分子動力学ソフトウェア・GENESISをプラットフォームとして、量子力学計算・分子力学計算、さらに、全原子分子動力学と粗視化分子動力学をベイズ統計に基づくユニークな手法を用いて多階層接続を試みる挑戦的で先駆的な提案である。この試みが成功すれば、当該分野に大きなインパクトを与えるとともに、その予見性から生命科学の広い学術領域の発展に大きく貢献するものと期待できる。</p>