

タンパク質のシミュレーション研究・実験データとの融合によるデータ同化研究



薬科学科(生命物理化学分野)

ふちがみ そう た ろ う

淵上 壮太郎

- 連絡先 TEL:054-264-5642 FAX:054-264-5644
E-Mail: sotaro.f@u-shizuoka-ken.ac.jp
- ホームページ <https://w3pharm.u-shizuoka-ken.ac.jp/bukka/>

キーワード

生物物理学、計算科学、生体分子、タンパク質、分子動力学シミュレーション、粗視化シミュレーション、データ同化、原子間力顕微鏡、イオンモビリティ質量分析



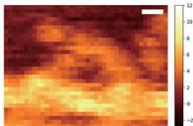
タンパク質は生命活動を担う多種多様な機能の実現に中心的な役割を果たしています。この機能実現のため、タンパク質の多くは適切な立体構造を形成します。また、タンパク質の立体構造は柔軟であり、大規模で複雑な運動を示すと同時に、外部からの刺激に応じて立体構造を変化させたりもします。このようなタンパク質の立体構造形成過程や複雑多様な運動の実態を理解し、精巧な機能が実現されるメカニズムを解明するとともに、創薬や医療産業への応用展開などを目指して、シミュレーションなどの計算手法を用いた研究に取り組んでいます。具体的には、実験の観測データとシミュレーションを融合するための計算技術である「データ同化」に着目し、原子間力顕微鏡やイオンモビリティ質量分析などで得られるタンパク質の実験データを用いたシミュレーション研究を進めています。

実験データとシミュレーションを融合する「データ同化」

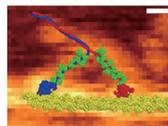
原子間力顕微鏡(AFM)とシミュレーション

フレキシブル分子フィッティングによってAFM像中のミオシンVの構造状態を推定

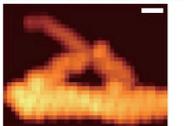
実験で観察されたAFM像



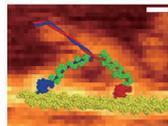
Down-up状態の場合



実験を模した疑似AFM像



Down-down状態の場合



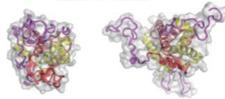
イオンモビリティ質量分析とシミュレーション

H2A/H2B二量体の気相中における構造多様性とその原因を解明

溶液中構造

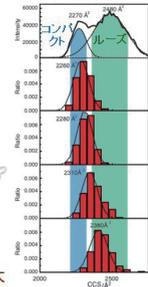


気相中構造



衝突断面積最小 衝突断面積最大

衝突断面積



実験

計算
400 K

計算
300 K

計算
200 K

計算
100 K

アピールポイント

タンパク質の構造や運動を観測する各種の実験手法に対して、シミュレーションを融合させるデータ同化解析を実施することが可能です。