

物性研究所短期研究会

理論タンパク質物性科学の最前線：理論と実験との密な協働

文責：筑波大学計算科学研究センター 教授 重田 育照

日 時：2022年7月26日 10:00 ～ 2022年7月27日 16:10

会 場：東京大学物性研究所本館6階 大講義室（ハイブリッド開催）

世話人：重田育照（筑波大学）、野口博司（物性研究所）、井上圭一（物性研究所）

URL：<https://noguchi.issp.u-tokyo.ac.jp/protein20/>

タンパク質は生命の基本要素であるが、各々のタンパク質はそれぞれ非常に異なる独特の物理的性質（物性）を有することが知られており、それらがタンパク質の機能につながっていると考えられます。したがって、タンパク質の物理的性質と機能の間の相関を研究することは、生命機能を理解する上で極めて本質的だと考えられます。

近年のスーパーコンピュータの発展、および解析手法の進展が相まって、生体内でおこる化学反応解析の分野は格段の進歩を遂げています。また、実験手法の精度の向上により適用限界も広がりを見せており、理論と実験との協働により、より深いレベルでの生命現象の理解が可能になると予想されます。

これまで物性研では固体系を中心に、表面、分子などの物性研究に対する共同利用・共同研究拠点として、また世界における物性研究の Center of Excellence として、分野を牽引してきました。今後は生体系や細胞レベルなど、既存の物性物理学・化学の枠を超えて、生物学や生命科学への貢献が期待されている状況です。

そこで、タンパク質物性科学における理論、計算と実験の共同研究について、最新の成果の情報交換をすると共に、今後の展望について議論するために、物性研の支援により本研究会をハイブリッド形式で開催させていただきました。

今回の研究会では、理論計算については、物性論でも馴染み深い分子動力学計算に基づくタンパク質ダイナミクス解析、ハイブリッド QM/MM 第一原理計算に基づく化学反応解析に加え、統計力学的積分方程式に基づく溶媒和理論、弾性体モデルに基づくオルガネラ形状の形成機構など、幅広い分野の講演をいただきました。また、実験については、X線・中性子・CryoEM等の構造解析技術、各種分光技術、1分子観察技術によるタンパク質構造・機能解析、および、タンパク質デザインや液液相分離現象など、生物物理で近年特に注目されているテーマについてご発表いただきました。また、16名のポスター発表においても、活発に議論がなされました。

本研究会を通して、生命科学における実験と理論の協働は今後もより発展していくであろうことが確認されたと確信しております。本研究会の注目度は非常に高く、参加登録数はオンライン参加も含め102名、現地参加は初日26名、二日目29名（計32名）、オンライン最大同時接続人数は67名でした。最後になりますが、本研究会にて講演を頂いた招待講演者の方々、現地及びオンラインでご聴講していただいたの方々、ポスター発表いただいたの方々、開催にご尽力いただいた世話人の先生・学生・スタッフの方々に心から感謝申し上げます。



プログラム

2022年7月26日(火)

10:00-10:10 Opening 野口博司

■ (座長 重田育照・筑波大学)

10:10-10:40 吉田紀生 (名古屋大学) 「生体分子の溶媒和統計力学理論によるタンパク質機能解析への展開」

10:40-11:10 五十嵐圭日子 (東京大学) 「固液界面におけるセルラーゼの動的挙動とシミュレーション化」

11:10-11:40 宮下治 (理化学研究所) 「構造生物学へのハイブリッドアプローチ：シミュレーションと実験データの融合」

11:40-12:10 中野祥吾 (静岡県立大学) 「遺伝的アルゴリズムと立体構造を用いた高機能化酵素デザイン」

■ (座長 新井宗仁・東京大学)

13:20-13:50 八木清 (理化学研究所) 「QM/MM法の開発と生体分子の振動解析と化学反応への応用」

13:50-14:20 柴田幹大 (金沢大学) 「タンパク質の構造変化をリアルタイムかつナノスケールで可視化する」

14:20-14:50 立川正志 (横浜市立大学) 「オルガネラを形作る力学」

■ (座長 石北央・東京大学)

15:10-15:40 秋山良 (九州大学) 「排除体積効果による溶液の分離」

15:40-16:10 新井宗仁 (東京大学) 「機能性タンパク質の理論的設計」

16:10-16:40 望月祐志 (立教大学) 「FMOプログラム ABINIT-MPの整備状況、ならびに FMO-DPD法の開発と応用」

■ (座長 永田崇・東京大学)

17:00-17:30 玉田太郎 (QST) 「電子伝達タンパク質の高分解能構造解析」

17:30-18:00 石北央 (東京大学) 「タンパク質中におけるプロトン移動と電子移動」

2022年7月27日(水)

■ (座長 野口博司・東京大学)

9:00-9:30 原田隆平 (筑波大学) 「生体機能を解明する分子シミュレーション手法の開発と応用」

9:30-10:00 庄司光男 (筑波大学) 「GLASアルゴリズムによる酵素反応機構の理論解明：新規反応経路探索手法の開発と適用」

10:00-10:30 吉澤拓也 (立命館大学) 「相分離性タンパク質 FUSの分子挙動解析」

■ (座長 原田隆平・筑波大学)

10:50-11:20 佐々木裕次 (東京大学) 「量子ビームを用いた1分子内部動態計測(DXT/DXB)の進展」

11:20-11:50 乙須拓洋 (埼玉大学) 「蛍光寿命の相関解析に基づく生体分子のダイナミクス解析」

13:00-14:30 ポスター発表 (対面のみ)

■ (座長 井上圭一・東京大学)

14:30-15:00 岩崎憲治 (筑波大学) 「病因となる天然変性タンパク質の構造・機能解析」

15:00-15:30 當舎武彦 (理研・SPring-8) 「金属酵素活性中心における一酸化窒素還元反応の分子機構」

15:30-16:00 寺川剛 (京都大学) 「分子シミュレーションと実験で解き明かすエピゲノム修飾継承の分子機構」

16:00-16:10 Closing



◎ ポスター講演者一覧：

甲田信一（分子科学研究所）	「精密反応モデリングとベイズパラメータ推定で明らかにするシアノバクテリア時計タンパク質 KaiC の多量体構造の機能的役割」
奥村久士（分子科学研究所）	「赤外自由電子レーザーによるアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション」
堀優太（筑波大学）	「酸化型[Ni-Fe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究」
H. Kowitz（筑波大学）	「Evaluation of brominated baicalein as a promising SARs-CoV-2 Mpro Inhibitor」
井上圭一（東京大学）	「タンパク質内プロトン移動が微生物ロドプシンの光機能を生み出すしくみ」
永田崇（東京大学）	「レチナル光異性化酵素として機能する動物ロドプシンの光吸収・反応特性の解析」
野地隼平（新潟大学）	「疎水表面の分極場のゆらぎに関する積分方程式理論」
藤浪大輔（静岡県立大学）	「アミノ酸残基レベルの熱力学的解析が明らかにした自由エネルギー関係」
鹿倉啓史（京都大学）	「アニオンチャネルロドプシン GtACR1 に対する QM/MM RWFE-SCF 法を用いた変異体モデリングおよび光励起エネルギー計算」
佐藤綾香（筑波大学）	「高電位鉄硫黄タンパク質のクラスター周辺の構造が及ぼす影響と電子状態についての理論的解析」
菱田真史（筑波大学）	「タンパク質の構造安定化に対する水和水の役割」
下山紘充（筑波大学）	「高次機能複合体設計を目指した 3D-DS 現象の計算科学的再現」
富山翔平（東京大学）	「分子シミュレーションにおける自由エネルギー計算手法の再重プロセスの二次補間による改良」
中西亮（東京大学）	「クロマチンポリマーモデルにおけるクラスター寿命の相転移」
安東智大（京都大学）	「QM/MM RWFE-SCF 法によるイクオリンのアロステリックな発光反応制御機構の理論解析」
荒井翔太（新潟大学）	「混み合った環境における粘性の理論」