

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 高速原子間力顕微鏡 1 分子計測のデータ同化による生体分子 4 次元構造解析法の開発
2. 研究代表者： 高田 彰二（京都大学大学院理学研究科 教授）
3. 中間評価結果

### 総合評価コメント

本研究課題は、データ同化と分子シミュレーション法によって、高速原子間力顕微鏡 (AFM) 計測からの生体分子の高精度 4 次元構造解析法を開発し、それを様々な細胞生物学的課題に適用し新たな生物学的発見に繋げることを目的としている。

中間評価時点での成果を示す。基礎研究における成果として、高速 AFM で得られた静止像に対して、適合する 3 次元分子構造モデルを求める方法をベイズ統計の枠組みによって構築した。分子動力学 (MD) シミュレーションによる AFM 像へのフレキシブルフィッティング法の計算パラメータをチューニングし、実際の高速 AFM 像への適用を行った。細菌鞭毛の輸送システムタンパク質 FlhAC 単量体の AFM 像について、フレキシブルフィッティング法により AFM 像と整合する原子レベルの構造モデルを得ることに成功した。また、科学的イノベーションに寄与する成果として、高速 AFM の時間分解能を律していた主要なデバイスである Z スキャナーに用いる圧電素子の小型化と圧電素子の固定法の工夫により、高速 AFM の時間分解能が従来比 6 倍に向上した。

今後はさきがけ「情報計測」1 期生終了者の松永康佑氏が参加したことにより、データ同化法等の情報アプローチが手厚くなったことによる研究加速も期待される。