

SICORP

「新たな国際頭脳循環モード促進プログラム」事後評価報告書

1 共同研究課題名

「生体分子系の分子シミュレーションと実験の相補的データ解析に向けた協働ネットワークの構築」

2 日本一相手国研究代表者名（研究機関名・職名は研究期間終了時点）：

日本側研究代表者

光武 亜代理（明治大学 理工学部 専任准教授）

アメリカ側研究代表者

若槻 壮市（SLAC 国立加速器研究所 光科学部門 スタンフォード大学
医学部 構造生物学科 教授）

3 研究概要及び達成目標

研究代表者らは、データ解析に緩和モード解析法を導入するなど物理学を基礎とした計算科学の手法をたんぱく質系の分子シミュレーションに応用し、近年は、これらの手法を駆使して、たんぱく質の機能メカニズムの解明に努めている。渡航先の研究室では、X線結晶構造解析を主とした構造生物学の研究を行っている。渡航する研究者（博士課程 1 年）は、渡航先で研究しているたんぱく質の最新の実験データを基に、大規模な分子シミュレーションを実行する。計算と実験を連携させて、対象たんぱく質の機能メカニズムの理解に関する研究を進める。

4 事後評価結果

4.1 研究成果の評価について

4.1.1 研究成果と達成状況

ミトコンドリア分裂制御に関わるタンパク質の機能メカニズム、リポゾームの翻訳開始における中間状態の遷移メカニズムについての大規模・長時間シミュレーションを行い、既知の現象や構造にミクロスコピックな描像を与えた。この成果は有力な雑誌に出版あるいは投稿された。

4.1.2 国際共同研究による相乗効果

計算結果が実験現場にフィードバックされることにより、新たな実験が試みられさらに計算との対比が検討されるという強い相互推進的な協力関係が実現した。

4.1.3 研究成果が与える社会へのインパクト、我が国の科学技術協力強化への貢献

極めて基礎的な生物学的知見を得る研究である一方、創薬にも直結し得る研究であり学術的にも実用的にも波及効果は大きい。

4.2 相手国研究機関との協力状況について

分野は全く異なる二つの研究グループ間で共通の意識と言葉をもつ理想的な状況にある。

4.3 その他

渡航者は限られた予算の中で 190 日近い滞在を実現した。意欲を評価する。また多数の会議においても発表賞を受賞しており更なる成長を期待する。