

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： NMR と計算科学の融合による in situ 構造生物学の確立と真核細胞内蛋白質の動態研究への応用
2. 研究代表者： 伊藤 隆（首都大学東京大学院理工学研究科 教授）
3. 中間評価結果

本研究課題で挙げられている3つのテーマに関する方法論の開発や改良面で進展がみられた。具体的には、①NMR シグナル帰属のための「SiCode 法」を開発して in cell NMR シグナルの帰属を効率的に実施できるようにした、②ベイズ統計を利用した高次構造を構築する方法を開発し、Bioreactor システムを用いて細胞試料の延命を行うことで、世界に先駆けて Sf9 細胞内の GB1 タンパク質の詳細な立体構造を解析した、③分子混雑系の大規模シミュレーションの結果が得られており、それにより細胞内代謝産物濃度によって構造変化が起こることがわかってきた。ただ、現在の技術ではこの in-cell NMR では非生理的条件でタンパク質構造を解析していることも否めないため、さらなる技術開発が期待される。生体内のタンパク質の挙動を知るための有力な手段として NMR による新しい分野を切り開く課題であるため、分子動力学 (MD) 計算のグループと具体的な問題を共有し、共同研究として取り組むことで課題後半の成果を期待したい。