

2023 年度年次報告書  
細胞の動的・高次構造体  
2022 年度採択研究代表者

山本 詠士

慶應義塾大学 理工学部  
専任講師

非膜性構造体内部における分子挙動の階層統合的理解

## 研究成果の概要

本研究の目的は、マイクロ階層(原子・分子レベル)・メゾ階層(相分離)を繋ぐマルチスケールシミュレーション手法を確立し、天然変性タンパク質とRNAが形成する非膜性構造体内部の動的不均一性が分子の拡散・局在・相互作用に与える影響を解明することである。本年度は、1つのアミノ酸を1粒子で表現する粗視化モデルを用い、ストレス顆粒を構成する主要な天然変性タンパク質であるG3BP1とFUSおよびRNA(polyA)を含む非膜性構造体の粗視化MDシミュレーションを行った。構造体の形成能および構造体内部の不均一性、構造体内部での分子局在、拡散挙動、分子間相互作用を解析した。また、粗視化MDシミュレーションから特徴的な構造をいくつか抽出し、全原子モデルを用いたMDシミュレーションを行った。密度や分子間相互作用を全原子モデルと粗視化モデルとで比較し、モデルの妥当性を確認した。また、非膜性構造体内部での水分子の回転緩和や振動スペクトルの解析を行い、特異な水分子挙動を明らかにした。