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

大出 真央

大阪大学 蛋白質研究所
助教

実験と計算の協奏による生体分子動態解析法の開発

研究成果の概要

本年度は現時点での研究計画のうち、

①MD 参照構造を用いた cryoEM 粒子像構造推定(分類)法の確立について特に注力して研究を進めた。

①について、前年度に定式化したアプローチでのプログラム実装を進めた。スレッド並列化なども含めて実装はほぼ完了し、現在はバグ取り及び動作検証を開始するところである。また、MD 計算と実験データによる統合的解析という視点から派生し、MD 計算と X 線小角散乱、NMR によるマルチドメイン蛋白質の動的構造モデリングなども実施した。

研究計画におけるもう一つのメインテーマである②植物蛋白質フィトクロム B(phyB)活性型の構造解析については、研究担当者の異動によって一時的に停止している。現在、装置導入を含めた実験系のセットアップを進めており、完了次第実験を再開する。