

ゲノムスケールの DNA 設計・合成による細胞制御技術の創出
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

炭竈 享司

金沢大学ナノ生命科学研究所／科学技術振興機構
特任助教／さきがけ研究者

シミュレーションによる染色体の動態解明と実測との比較

§ 1. 研究成果の概要

2021年度の成果は、1. 染色体を模した高分子の3次元版の原子間力顕微鏡 (three-dimensional atomic force microscopy, 3D-AFM) 像を理論予測するシミュレーション手法の開発と3D-AFM像の走査速度依存性に関する論文を出版したこと、2. アクチン繊維等の3D-AFM像の実測との比較を行い、開発した3D-AFM像のシミュレーション手法の妥当性を検証したこと、3. Hi-C実験のデータからヘテロクロマチンとユークロマチンを識別する新規手法を考案した、ことである。

1.の3D-AFM像の理論計算の手法については、昨年度の研究成果に詳細に報告したが、ようやく論文に採択された¹⁾。査読の過程で、実測との比較を行い開発した手法の妥当性を検証するようコメントがあった。そこで、実際の構造と3D-AFM像の両方が分かっている唯一の生体高分子であるアクチン繊維について、それを模した構造を作成して3D-AFM像の理論予測を行い、実測との比較を行った。その結果、シミュレーションにより実験結果をよく再現することに成功し、開発したシミュレーション手法が妥当であることが分かった。これが2.の概要であり、論文に記載して報告している¹⁾。

本さきがけの最も重要な目標は、より確からしい染色体モデルの構築である。そのために欠かせない次のステップは、ヘテロクロマチンのモデルの導入である。3.はこの導入方法の開発の際に考案したものである。従来、Hi-C実験のデータを解析することでヘテロクロマチンとユークロマチン領域が識別できることはよく知られているが、従来の方法は幾つかの理論的な問題点があり、何より直感的にはその方法がよく分からない欠点があった。そこで、直感的に理解できる識別法を考案したので、これも一つの成果とする。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Computed three-dimensional atomic force microscopy images of biopolymers using the Jarzynski equality”, *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 13, No. 23, pp. 5365–5371, 2022, doi: 10.1021/acs.jpcllett.2c01093.