

細胞の動的・高次構造体
2022 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

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(IDP)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種類のIDPのみで形成される非膜性構造体のMDシミュレーションを行い、非膜性構造体の内部および水界面近傍での分子構造や分子挙動の変化を解析した。シミュレーションには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、慣性半径や密度など、実験との比較を行いモデルの妥当性も検証した。また、複数種類の生体分子が非膜性構造体を形成した際の構造体内部の不均一性を明らかにするために、IDPとRNA(polyA)混合系の粗視化MDシミュレーションを行った。いくつかの種類のIDPに対して、polyAとIDPの混合割合、polyAの長さなどをパラメータとしてMDシミュレーションを行い、構造体の形成能および構造体内部の不均一性を解析した。