

計算生物物理学 (原田 隆平)

Computational Biophysics (HARADA Ryuhei)



HARADA Ryuhei, Ph.D.
Associate Professor
Division of Life Science,
Center for Computational Sciences,
University of Tsukuba



E-mail address: ryuhei@ccs.tsukuba.ac.jp

URL: https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/ccs_introduction/teacher/list/depart_life/

分子シミュレーションで生体機能を解明する

細胞を構成する生体分子は物理法則に従い運動し、生体機能を発揮しています。機能解明の研究手段として分子シミュレーション、特に分子動力学シミュレーション(Molecular Dynamics Simulation: MD)は強力であり、生体分子のダイナミクスを高い時間空間分解能で追跡できます。しかし、技術的な問題点から現状のMDシミュレーションが到達可能な時間スケールは機能発現する時間スケールと比較して極めて短いため、生体機能に重要なダイナミクスを抽出し解析することが困難です。そこで我々は、現状のMDが抱える時間スケール問題を打開するため、新しいシミュレーション手法の研究を進めています。具体的には、重要な分子構造を同定し、短時間MDを繰り返す「分散型シミュレーション」を利用し、通常のMDでは抽出困難な生体分子ダイナミクスの解析に成功しています。今後は、開発手法を様々な生命現象に適用し生体機能を解明することで、研究成果の還元を目指します。

Molecular Simulation Unveils Biological Functions

Biological Molecules such as proteins make several biological functions in cell based on the laws of physics. Molecular Simulation, particularly, molecular dynamics simulation (MD) is one of powerful tools to unveil the biological functions because MD can trace protein dynamics with fine temporal/special resolution. However, it is still difficult to reproduce/predict protein dynamics induced in the long-time (over microsecond-order) time scale. Therefore, it is strongly desired to develop new computational methods. Our methods are based on distributed sampling, i.e., short-time (picosecond-order) MD are independently launched from different initial structures, promoting rare events relevant to the biological functions. As representative rare event sampling method, see the following references (J. Chem. Phys., 139, 035103 (2013), Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 6155 (2015), Bull. Chem. Soc. Jpn., 91, 1436 (2018))

T-R Transition of FtsZ Monomer Promoted by Our Method, Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD)

Application of PaCS-MD: Cell Division

