

課題名(タイトル):

## 電子顕微鏡による単粒子解析

利用者氏名:

○竹本 千重, 横山 武司, 加茂 友美, 長内 隆, 赤坂 領吾

理研における所属研究室名:

生命機能科学研究センター タンパク質機能・構造研究チーム

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

生命科学の分野において、生体高分子の複合体の高分解能構造情報を得ることは、それらの生理的機能や制御機構を知る上で重要である。クライオ電子顕微鏡解析は、NMR 解析や X 線結晶構造解析と並んで、主要な構造解析手法のひとつである。近年、電子直接検出器の開発によって、著しく感度と分解能が向上し、試料調製からデータ収集においては、飛躍的なハイスループット化が進んでいる。計算機自体の性能向上と共に、取得した二次元画像から三次元構造を得るためのプログラムも日進月歩で改良が進んでおり、複数のパラメータの組み合わせを検討しようとする、膨大な計算資源を浪費してしまうことになる。そのため、正しい構造を得るためのスキームの確立と、それによるアウトプットの迅速化が重要な課題となっている。また、実験的に得られた高分解能の立体構造情報は、分子シミュレーションに供して動的構造解析を行うことにより、分子間相互作用などの意味を考察することは、今や必須の課題といっても過言ではない。

実際、クライオ電子顕微鏡による高分解能解析を用いる研究においては、ターゲット分子(複合体)の設計、調製方法の検討、取得画像の処理、構造モデルの構築、動的構造解析など様々な局面で計算機による予測や解析が必要となっている。本課題では、これらの諸段階で必要となる計算機環境を、研究室でのローカル環境と比較・検討を行いながら模索する。また、すでにスパコン上に整備されている AMBER 等のプログラムの利用や、ローカルで計算資源の不足が生じた場合の利用を想定していた。

## 2. 利用がなかった場合の理由

本年度は、まだ利用していない。第一の理由は、センターで導入を進めている GPU 計算機で、十分業務を遂行できているからである。第二には、GPU を使うことで計算時間を短縮できる処理(プログラム)を多用しているためである。また、課金のシステムがよく理解できていないということも少し影響している。

今後、多数の CPU を使う長時間の計算(動的構造計算)などが必要になった場合には、また利用したいと考えている。