

平成30年度 基盤研究（S） 審査結果の所見

研究課題名	光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる 遍在プロトンの機能解明
研究代表者	中井 浩巳 (早稲田大学・理工学術院・教授) ※平成30年7月末現在
研究期間	平成30年度～平成34年度
コメント	<p>本研究は、核の運動を明確に捉える独自の量子的分子動力学シミュレーション DC-DFTB-MD 法を光受容タンパク質などの生物システムに拡大適用して、プロトンの振る舞いを明らかにする意欲的な研究である。プロトンを量子化学的に扱えることは従来の量子化学計算の限界点を打ち破るもので重要であり、学術的意義も高い。</p> <p>また、化学及び関連分野に遍在するプロトンの機能解明は、生物系以外への波及効果も期待できる。</p>