

研究概要等

結晶学の理論が魅力的なので新しい方向を研究する

概要：本ユニットでは新しい結晶学データ解析手法の開発を通じ、構造生物学における結晶学の適用範囲を拡大できるようにすることを期待して研究を行う。

背景：構造生物学の歴史上、結晶学は大きな役割を果たしてきた。しかし近年、結晶学で立体構造決定を行う必然性は薄くなってきたとも言われる。Cryo-EMを用いた単粒子解析などの実験や、AlphaFoldなど立体構造予測技術の発展の影響が大きい。これらの新技術の発展にも計算機能力向上が一役買っている。他方、結晶学の理論自体は奥深く、今でも学ぶ価値があるように思われ、私は結晶学を題材に何か新しい計算手法を開発してみたいと考えた。特に、結晶学の競合技術に投入されるのと同レベルの計算機能力を、結晶学にも突っ込んだら何が起きるのか気になったため、素朴にやってみることにした。

これまでの成果等

残念ながら現時点で特筆すべき成果はない

- ・ 回折データを処理するためのプログラムの実装を開始 (Apr. 2024)
 - ・ テストデータ作成完了 (May 2024)
 - ・ 回折データの読み込み部分の実装を完了 (Apr. 2024)
 - ・ 結晶学的対称性を考慮して実空間データを扱うための実装を開始 (Sep. 2024)
 - ・ 対称性の理論部分を理解するために座学コースに参加 (Aug. 2024：ただ勉強しただけ)
 - ・ 公開されている実験データの正規化を開始 (Sep. 2024)
- ・ 実験手法の洗練を目指した共同研究を開始 (Oct. 2024)
- ・ 予算申請
 - ・ JST ACT-X "生命と情報"領域：「実現性に説得力がない & この分野で業績がない → 不採択」 (Sep. 2024)
 - ・ JST BOOST：「不採択」 (Nov. 2024)

今後の計画・構想等

理論に対する習熟を深め実装を地道に進める

- ・ プログラムの部品ができてきたので、これらを統合してテストデータでの計算を進める。
- ・ 構想している実験スキームが実現できるよう、試料作成方法の実験的な試行錯誤を進める。
- ・ 身の丈にあったグラントに申請をおこなう。