



The 940th IMS colloquium
since 1976

(「若手独立フェロー業績報告会」)

生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの 分子シミュレーションとモデリング

Molecular simulation and modeling of functional dynamics
in biomolecular machines



岡崎圭一 特任准教授

分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

日時: 2020年1月17日(金) 16:45-

場所: 分子科学研究所 研究棟201

本講演は教授会終了後になります。開始が遅れる場合がございますのでご了承ください。

生体分子マシンは、細胞内で生命活動に必要なエネルギー生産、物質輸送、物質変換などを行う主にタンパク質からなるナノマシンである。このような生体分子マシンは、機能する際に、大きく構造変化したり、1方向に運動したりすることが知られている。私は、生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの分子動力学 (MD) シミュレーションや統計力学的モデリングを行うことで、その動作メカニズムの解明に取り組んでいる。今回は、 Na^+/H^+ 交換輸送体という膜トランスポーターのイオン輸送メカニズム [1]、Pacsin1 という F-BAR タンパク質による生体膜変形メカニズム [2]、キチナーゼという分子モーターの1方向性運動のモデル推定などの研究についてお話ししたい。

[1] Okazaki *et al. Nat. Commun.* 10, 1742 (2019)

[2] Mahmood, Noguchi and Okazaki, *Sci. Rep.* 9, 14557 (2019)

