

林 重彦 (はやし しげひこ)

【研究課題名】柔らかな分子がもたらす触媒活性の理解と設計



京都大学大学院理学研究科化学専攻 教授

【E-mail】 hayashig@kuchem.kyoto-u.ac.jp

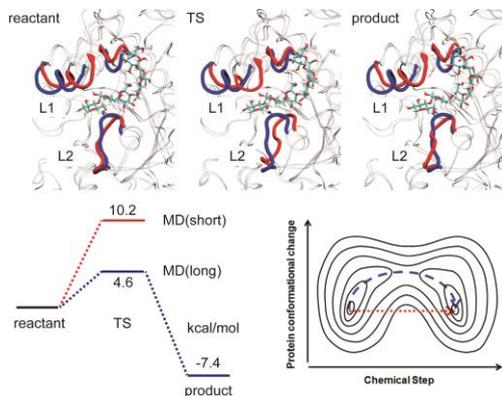
【専門】分子シミュレーションによる分子科学・生物物理学

【キーワード】酵素反応、光受容体タンパク質、モータータンパク質、ハイブリッド QM/MM 法、分子動力学法

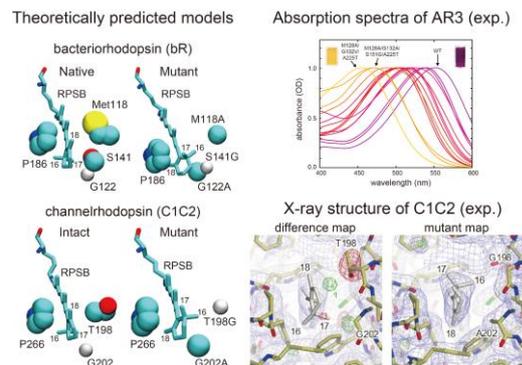
新規なハイブリッド分子シミュレーション法を用いて、酵素分子や超分子の柔らかさがもたらす触媒活性の分子機構の理解を進めます。さらに、得られた物理化学的知見に基づき、新規触媒活性を有する酵素分子や超分子の設計に挑戦します。

〈研究グループアクティビティ〉

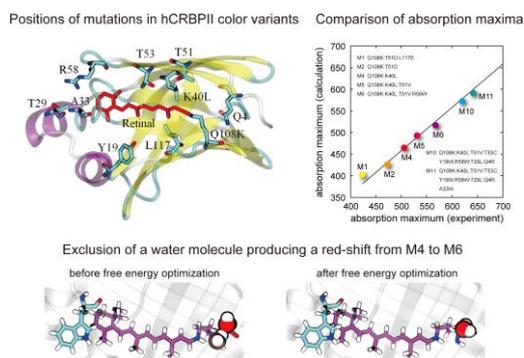
新規ハイブリッド分子シミュレーションによる酵素反応の研究



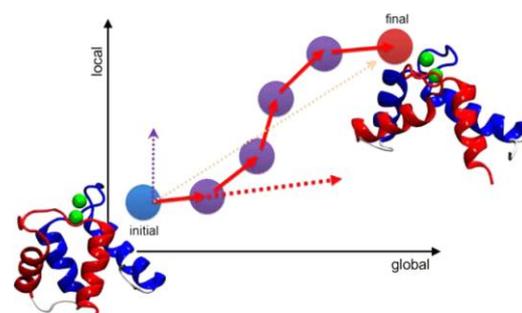
光遺伝学で用いられる膜タンパク質の色変異体の原子論的設計



水溶性レチナル結合タンパク質色変異体の理論的解析



タンパク質の大規模構造変化を予測する新規シミュレーション手法の開発



Shigehiko HAYASHI

【Research Subject】 Theoretical Analysis and Rational Design of Catalytic Activity of Flexible Molecules



Professor

**Department of Chemistry, Graduate School of Science
Kyoto University**

【E-mail】 hayashig@kuchem.kyoto-u.ac.jp

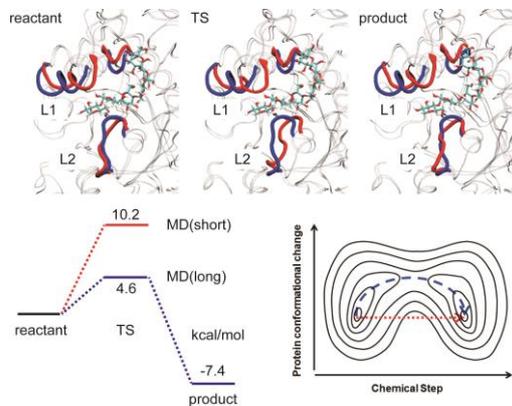
【Speciality】Molecular Science and Biophysics by Computer Simulations

【Keywords】 Enzymatic Reactions, Photoceptor Proteins, Motor Proteins, Hybrid QM/MM Simulations, MD simulations.

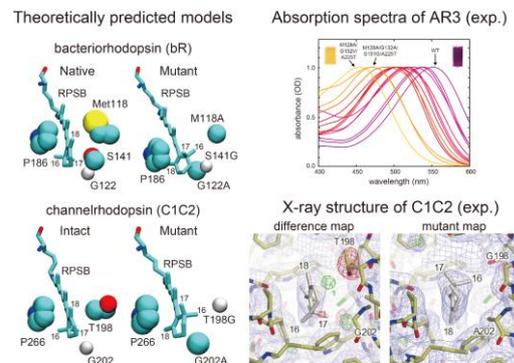
We pursue theoretical studies to understand molecular mechanism of catalytic activity of flexible molecules such as enzymes and supramolecules by means of new techniques of hybrid molecular simulations. Our aim is to rationally design novel catalytic activities of the flexible molecules on the basis of physical chemistry.

Research Group Activity

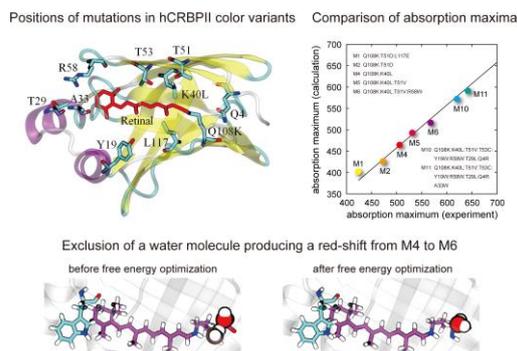
Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis



Atomistic Design of Color Variants of Optogenetics Tools



Theoretical Analysis of Anomalous Spectral Shifts of Color Variants of a Soluble Retinal Binding Protein



Development of a Molecular Dynamics Simulation Method for Prediction of Large Conformational Changes of Protein

