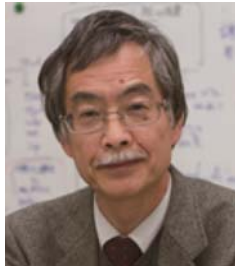


櫻井 実 (さくらい みのる)

【研究課題名】トランスポーター分子の柔らかさが鍵を握る多剤認識メカニズムの解明と阻害剤設計の基礎



東京工業大学バイオ研究基盤支援総合センター 教授

【E-mail】 msakurai@bio.titech.ac.jp

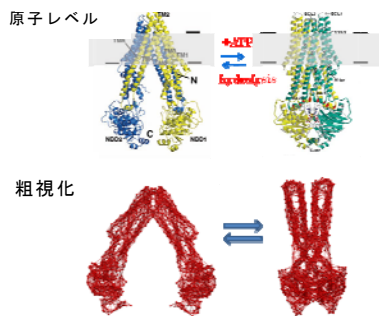
【専門】生体分子の計算化学、生物物理学

【キーワード】ABC トランスポーター、光受容体、天然変性タンパク質(IDP)、水和、アロステリー、計算機シミュレーション

トランスポーター分子に特徴的な多剤認識は、その構造柔軟性から生じると推測される。本研究では、MD シミュレーション等を駆使し、そのメカニズムを解明し、阻害剤設計の基礎を確立します。

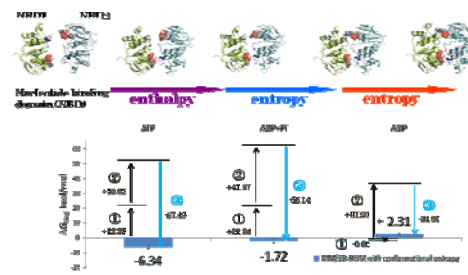
〈研究グループアクティビティ〉

マルチスケール MD によるタンパク質機能運動の解析



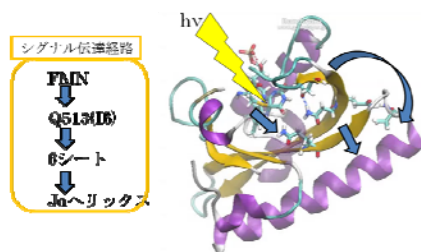
ABC トランスポーターの内向き構造から外向き構造への変化の追跡

タンパク質-リガンド結合自由エネルギーの解析



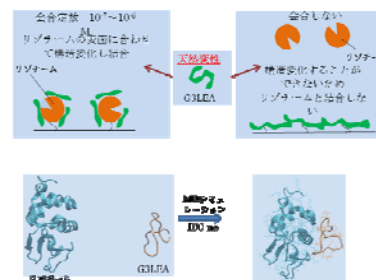
3D-RISM 計算による nucleotide binding domain の 2 量体化の解析

拡張バイアスポテンシャル MD によるタンパク質のアロステリーの解析



Accelerated MD による LOV ドメインのシグナル伝達経路の解析

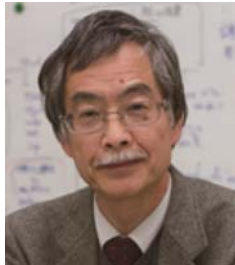
天然変性タンパク質の実験的・計算化学的研究



生物の乾燥耐性発現に関与する G3LEA タンパク質は典型的な IDP

Minoru Sakurai

【Research Subject】 Elucidation of the mechanism of multidrug recognition in transporter proteins and the molecular design of their inhibitors



Professor
Center for Biological Resources and Informatics
Tokyo Institute of Technology

【E-mail】 msakurai@bio.titech.ac.jp

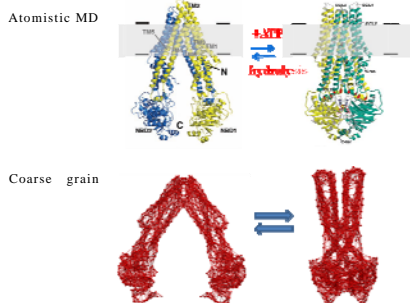
【Speciality】 Computational Chemistry, Biophysics

【Keywords】 ABC transporter, photoreceptor, intrinsically disordered Protein (IDP), hydration, allostery, computer simulation

The multidrug recognition (MDR) in transporter proteins may be caused as a result of their conformational flexibility. In this study, we elucidate the molecular mechanism of MDR using computer simulations and our goal is the molecular design of effective inhibitors.

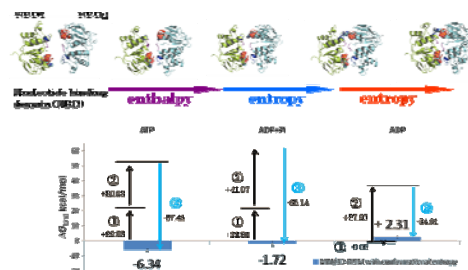
Research Group Activity

Analysis of the functional motions of proteins using multiscale MD simulation



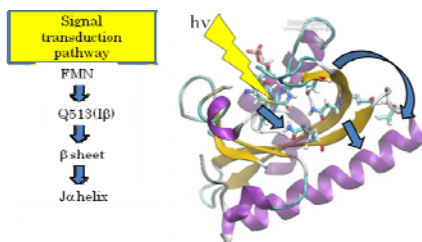
Transition from an inward- to outward-facing structure in ABC transporter

Calculation of protein-ligand binding free energy



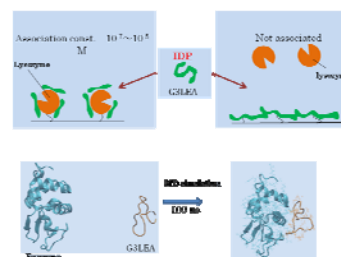
Analysis of the dimerization process of nucleotide binding domains based on 3D-RISM calculations

Analysis of the allostery of proteins using generalized-bias potential MD



Analysis of the signal transduction pathway of LOV domain

Experimental and computational study of IDP



A typical IDP, G3LEA protein, is responsible for the desiccation tolerance of organisms.