

吉田紀生（よしだのりお）

構造と環境の柔らかさが相関した光駆動イオン輸送の解明



九州大学大学院理学研究院 准教授

【E-mail】 noriwo@chem.kyushu-univ.jp

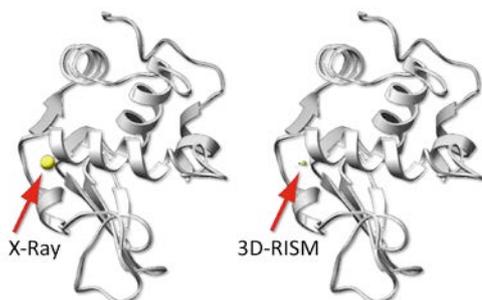
【専門】 理論化学, 液体論

【キーワード】 液体の積分方程式理論、分子認識

液体の統計力学理論（RISM 理論・MOZ 理論等）を中心に分子動力学法や電子状態理論を援用し、生体分子と水やイオンの織りなす生体機能の解明をめざしています。本研究課題では特に光駆動イオンチャネル（チャネルロドプシン等）のイオン輸送経路と構造の柔軟な相関の解明をめざします。

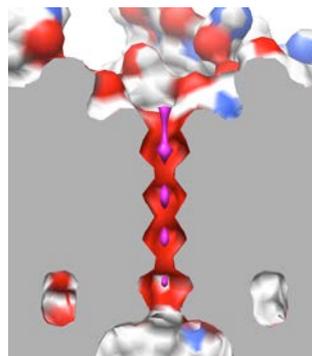
〈研究グループアクティビティー〉

生体分子の分子認識解析



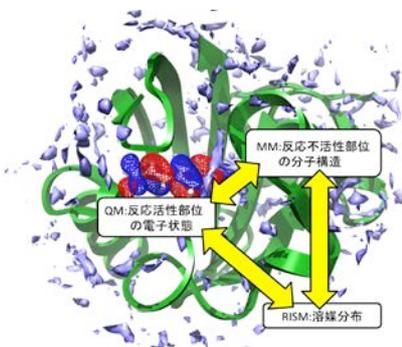
リゾチームの選択的イオン認識を
3D-RISM 理論で再現

イオン選択性の解析



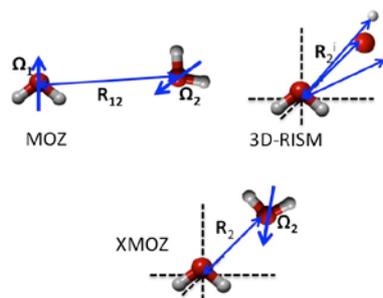
KcsA チャンネル内の選択的イオン分
布と水分子の相関を解明

溶液内生体分子の電子状態理論



QM/MM および FMO と 3D-RISM の
連成計算手法の開発と応用

新規積分方程式理論の開発



MOZ と 3D-RISM の要素を兼ね備え
た新しい理論の開発と応用

Norio YOSHIDA

【Research Subject】 Theoretical study of ion transportation of light-driven channel



Associate Professor

**Department of Chemistry, Graduate School of Sciences
Kyushu University**

【E-mail】 noriwo@chem.kyushu-univ.jp

【Speciality】 Theoretical Chemistry, Statistical Mechanics of Liquids

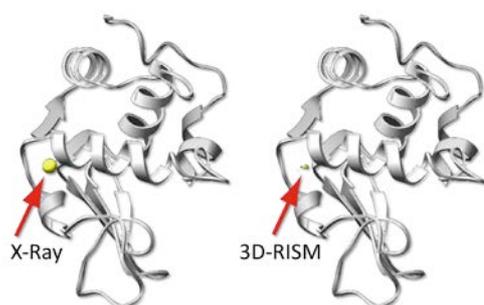
【Keywords】 Integral Equation Theory of Liquids,

Molecular Recognition

My research interest includes molecular thermodynamics, molecular recognition, and chemical processes of biomolecules in solution.

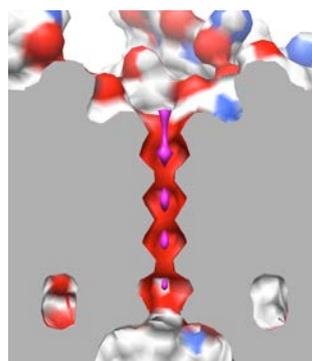
Research Group Activity

Molecular Recognition



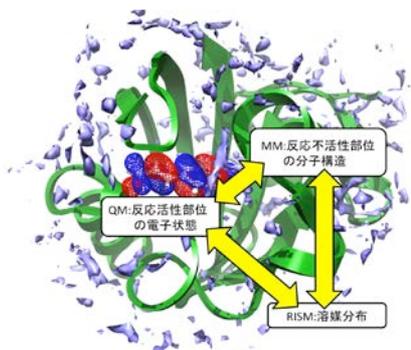
Selective ion binding by human lysozyme

Selective Ion Permeation



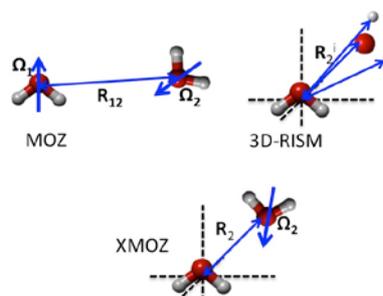
Distinct configurations of cations and water in KcsA channel

Electronic Structure Theory of Solvated Macromolecules



Development of hybrid method of QM/MM or FMO with 3D-RISM

A New Integral Equation Theory of Liquids



Extended MOZ (XMOZ) theory can handle angular dependent solvent distribution around macromolecule