

## 森俊文（もりとしふみ）

【研究課題名】タンパク質の構造変化と化学反応が織り成す

協働的な反応機構の解明



分子科学研究所 助教

【E-mail】mori@ims.ac.jp

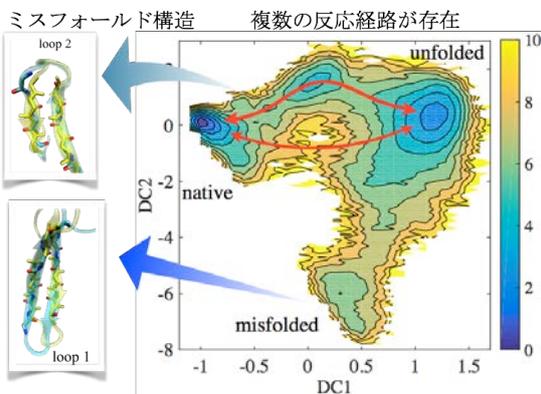
【専門】理論化学，生物物理化学

【キーワード】分子動力学法，構造変化ダイナミクス，ATP加水分解，時計タンパク質，タンパク質フォールディング

タンパク質が機能を発現するうえで重要な構造揺らぎや状態間の遷移など、タンパク質の持つ動的な構造をダイナミクスの観点から明らかにします。さらに、タンパク質中で起こる化学反応とタンパク質の構造変化の協働的な反応機構の解明を目指します。

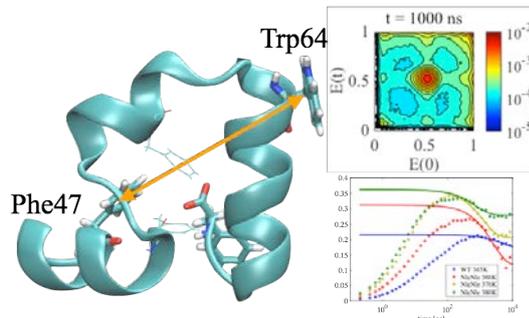
## 〈研究グループアクティビティ〉

## タンパク質のフォールディング過程の解析



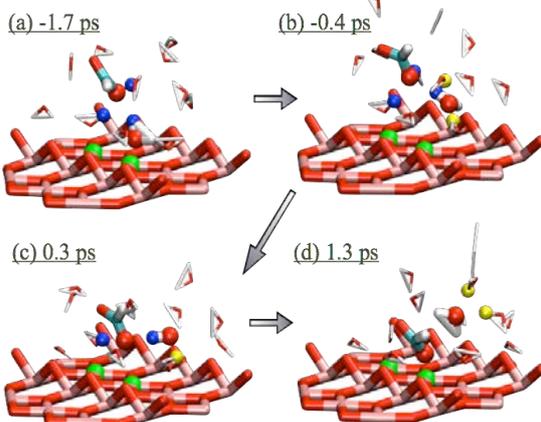
FiP35タンパク質のフォールディング過程における反応経路やミスフォールド状態

## タンパク質の不均一な構造変化や遷移ダイナミクスを捉える解析法の開発



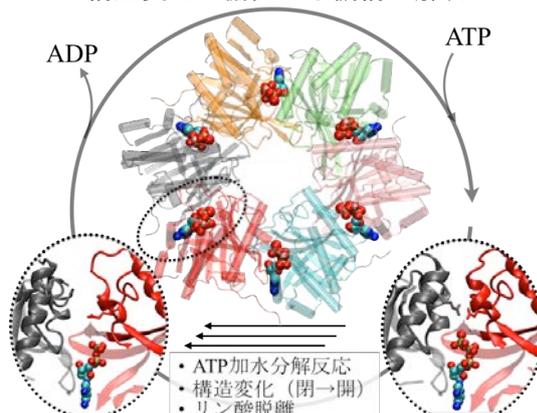
HP35タンパク質の構造変化の過程と遷移の時間スケールをPhe-Trp距離の時間変化の履歴をたどることにより解析

## 反応の遷移過程のダイナミクスの解析



固液界面における分子の吸着過程を遷移トラジェクトリを通して解析

## タンパク質中で起こる化学反応と構造変化の協働的な機構の解明



KaiCでのATP加水分解反応とタンパク質の構造変化の協働的な反応と反応サイクル

**Toshifumi Mori**

【Research Subject】 Molecular study of the interplay between chemical reactions and protein conformational changes in biomolecular systems



**Assistant Professor**  
**Institute for Molecular Science**

【E-mail】 mori@ims.ac.jp

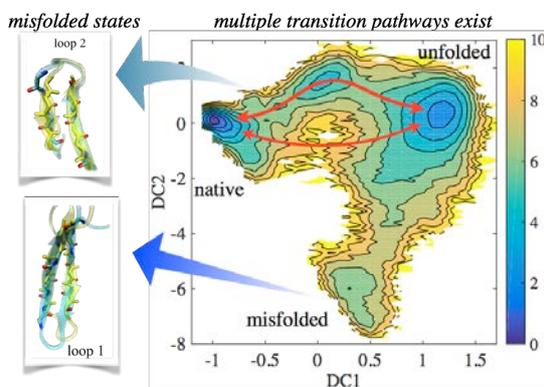
【Speciality】 Theoretical chemistry, Biophysical chemistry

【Keywords】 MD simulation, Conformational dynamics, ATP hydrolysis, Clock protein, Protein folding

We study how conformational changes, which are likely to be the key for proteins to function, occur by analyzing the transition dynamics of proteins. We also work towards understanding the interplay of chemical reactions and conformational changes in biomolecular systems.

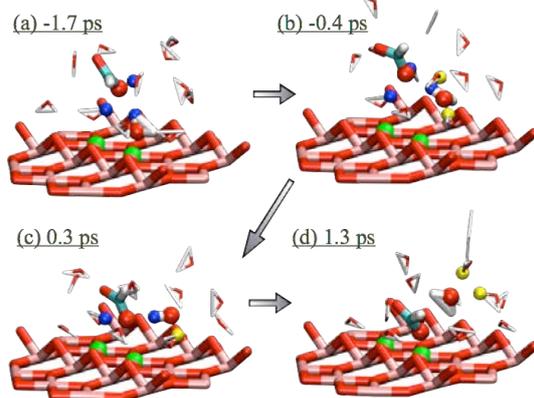
*Research Group Activity*

**Analysis of protein folding mechanisms**



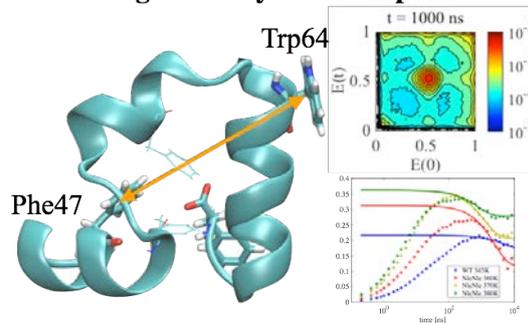
Folding transition pathways and misfolded states from the trajectory of FiP35 WW domain

**Transition dynamics analysis of condensed phase reactions**



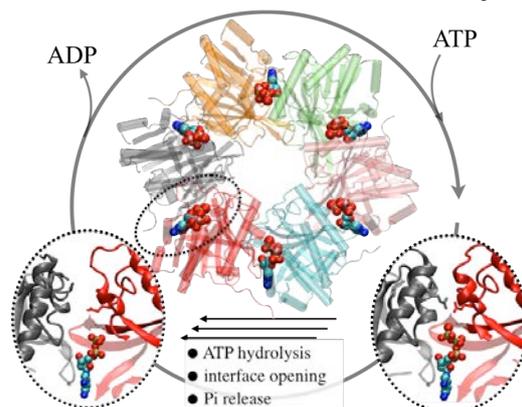
Transition dynamics of adsorption at the metal oxide - water interface

**Development of new approaches to analyze heterogeneous dynamics of proteins**



Analyze how villin headpiece HP35 takes different configurations during folding/unfolding transitions through the Phe-Trp distance history

**Study of the interplay between chemical reaction and conformational transitions in biomolecular systems**



Reaction cycle of coupled ATP hydrolysis and conformational changes in clock protein KaiC