

櫻井 実 (さくらい みのる)

【研究課題名】柔らかく蛋白質のアロステリーを水和効果を含む自由エネルギー地形解析から探る



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

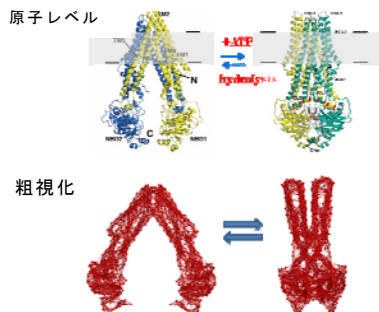
【専門】 生体分子の計算化学、生物物理学

【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、水和、アロステリー、計算機シミュレーション

ABC トランスポーター、ロドプシンをはじめとする光受容体、天然変性タンパク質などの機能の発現には、それらの分子の柔軟性と水和が深く関係しています。本研究では、MDシミュレーション等を駆使し、自由エネルギー地形の観点からメカニズムを解明します。

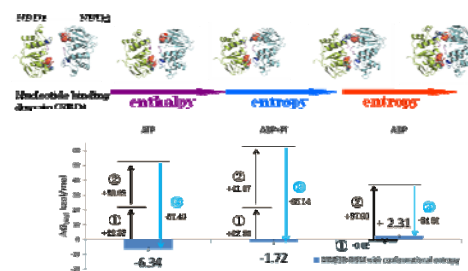
〈研究グループアクティビティー〉

マルチスケール MD によるタンパク質機能運動の解析



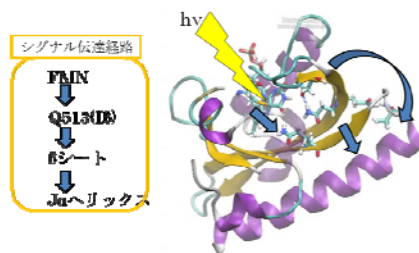
ABC トランスポーターの内向き構造から外向き構造への変化の追跡

水和自由エネルギー計算によるタンパク質機能運動の解析



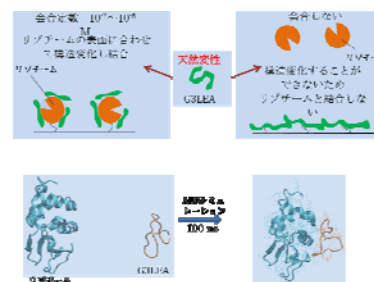
3D-RISM 計算による nucleotide binding domain の 2 量体化の解析

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



生物に極限乾燥耐性を付与する G3LEA タンパク質の特徴は柔らかさ

Minoru Sakurai

【Research Subject】 Hydration Effects and Free Energy Landscapes Determining the Allostery of Flexible Proteins



Professor

Center for Biological Resources and Informatics

Tokyo Institute of Technology

【E-mail】 msakurai@bio.titech.ac.jp

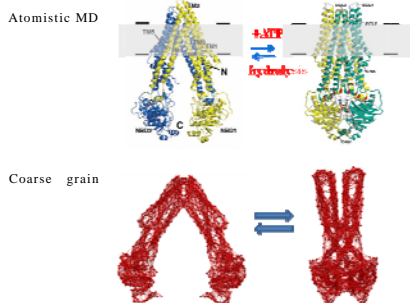
【Speciality】 Computational Chemistry, Biophysics

【Keywords】 ABC transporter, photoreceptor, intrinsically disordered protein, hydration, allostery, computer simulation

The biological functions of ABC transporter, photoreceptor and intrinsically disordered protein (IDP) come from their conformational flexibilities and hydration structures. In this study, we elucidate their functional mechanisms using various types of computer simulations.

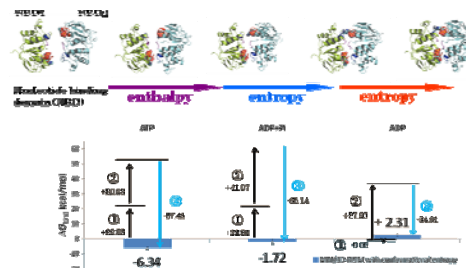
Research Group Activity

Analysis of the functional motions of proteins using multiscale MD simulation



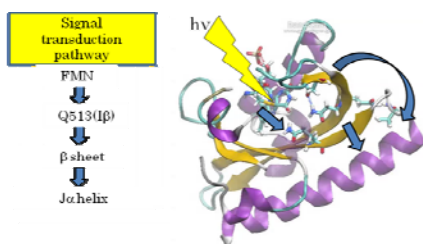
Transition from an inward- to outward-facing structure in ABC transporter

Analysis of the functional motions of proteins based on hydration free energy calculations



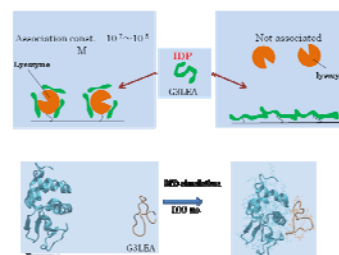
Analysis of the dimerization process of nucleotide binding domains based on 3D-RISM calculations

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



Analysis of the signal transduction pathway of LOV domain based on accelerated MD

Experimental and computational study of IDP



Conformational flexibility is essential for the occurrence of biological function of G3LEA protein