

## 吉田紀生（よしだのりお）

チャンネルロドプシンのイオン輸送の理論化学



九州大学大学院理学研究院 准教授

【E-mail】 noriwo@chem.kyushu-univ.jp

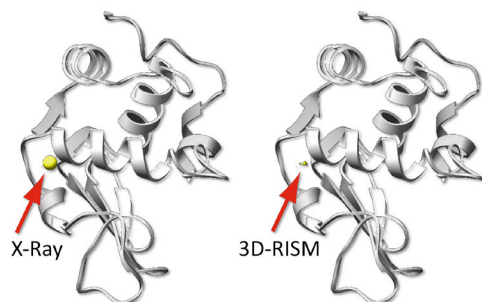
【専門】 理論化学, 液体の統計力学理論

【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チャンネルロドプシンのイオン輸送経路と構造の柔らかな相関の解明をめざします。

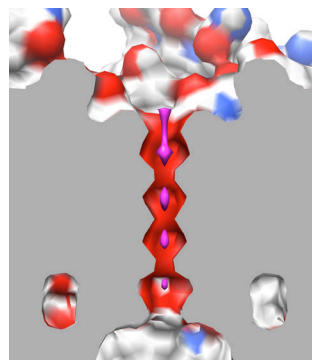
## 〈研究グループアクティビティー〉

## 生体分子の分子認識解析



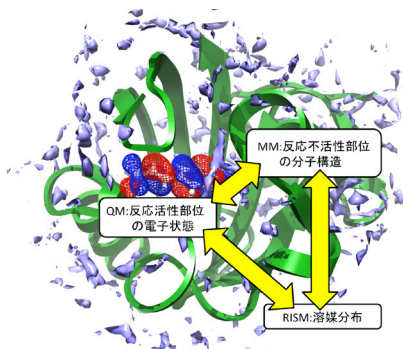
リゾチームの選択的イオン認識を  
3D-RISM理論で再現

## イオン選択性の解析



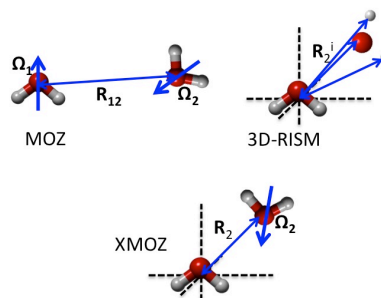
KcsAチャンネル内の選択的イオン分  
布と水分子の相関を解明

## 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 permeation of Channel-rhodopsin



**Associate Professor**

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

【E-mail】 noriwo@chem.kyushu-univ.jp

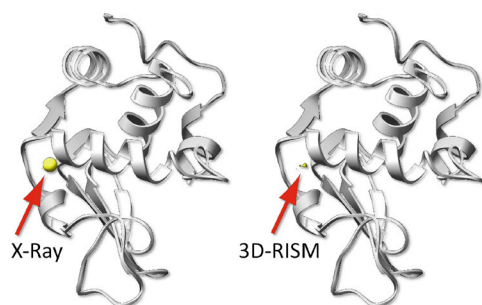
【Speciality】 Theoretical Chemistry, Statistical Mechanics of Liquids

【Keywords】 Integral Equation Theory of Liquids,  
Molecular Recognition

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

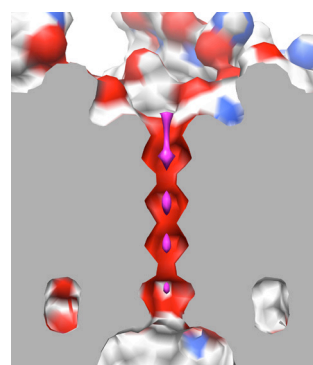
### Research Group Activity

#### Molecular Recognition



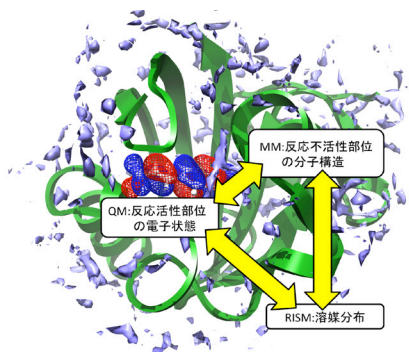
Selective ion binding by human lysozyme

#### Selective Ion Permeation



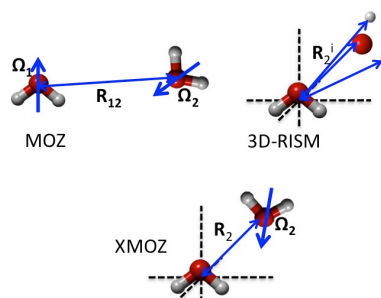
Distinct configurations of cations and water in KcsA channel

#### 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