

## 漣上壮太郎（ふちがみそうたろう）

【研究課題名】ヒストンテールのしなやかさに由来する動的挙動の解明



横浜市立大学 大学院生命医科学研究科 助教

【E-mail】sotaro@tsurumi.yokohama-cu.ac.jp

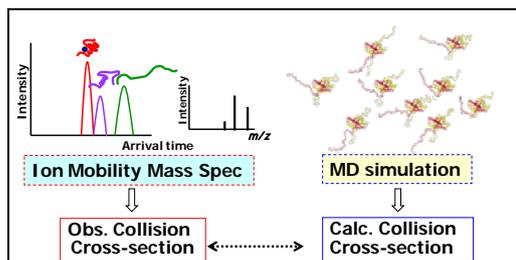
【専門】生物物理学、計算科学

【キーワード】分子動力学シミュレーション、天然変性、  
イオンモビリティ質量分析

ヒストンテールのしなやかさが生み出す動的挙動の分子基盤を解明すべく、イオンモビリティ質量分析と分子動力学シミュレーションを組み合わせた研究を展開します。そして翻訳後修飾がヒストンテールの構造・ダイナミクスに与える影響の解明を目指します。

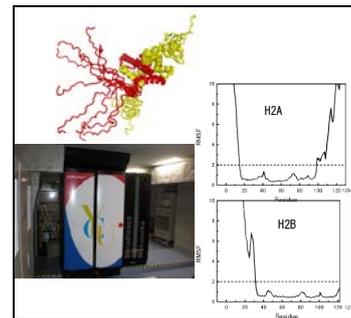
### 〈研究グループアクティビティー〉

#### 実験と計算の融合研究



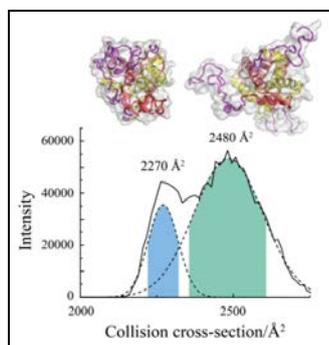
イオンモビリティ質量分析 (IM-MS) データを分子動力学シミュレーション (MD simulation) で解析する

#### 並列計算可能なスパコンによる MD シミュレーション



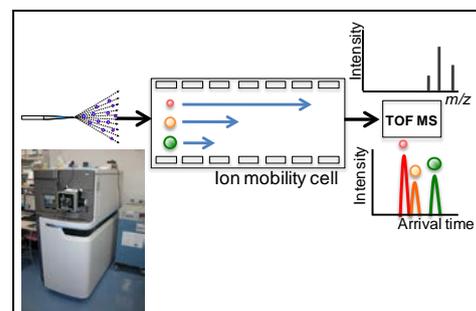
水溶液における H2A/H2B 二量体の解析

#### IM-MS で観測される構造多様性の MD シミュレーションでの検証



気相における H2A/H2B 二量体の解析

#### イオンモビリティ質量分析装置 Synapt G2 HDMS



イオンモビリティ質量分析装置で衝突断面積と  $m/z$  の情報を得る

## Sotaro Fuchigami

【Research Subject】 Characterization of structural dynamics of flexible histone tails



**Assistant Professor**

**Graduate School of Medical Life Science**

**Yokohama City University**

【E-mail】 sotaro@tsurumi.yokohama-cu.ac.jp

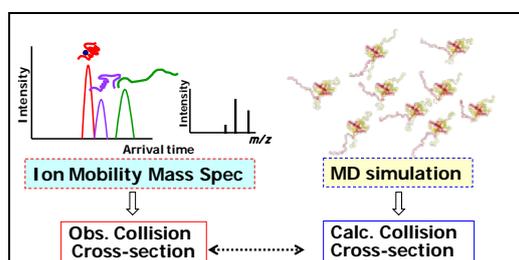
【Speciality】 Biophysics, Computational Science

【Keywords】 Molecular Dynamics Simulation, Intrinsically Disordered Region, Ion Mobility Mass Spectrometry

To identify the molecular basis for structural dynamics of flexible histone tails, characterization of the histone H2A/H2B dimer, with or without modification, will be performed using ion mobility mass spectrometry and molecular dynamics simulation.

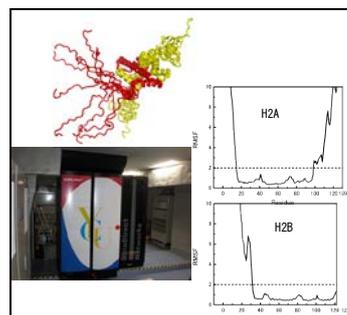
### Research Group Activity

#### Integrated research of experiment and calculation



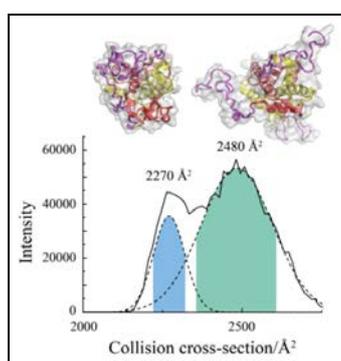
MD simulation for data analysis of Ion Mobility Mass Spectrometry (IM-MS)

#### MD simulation using Super-Computer



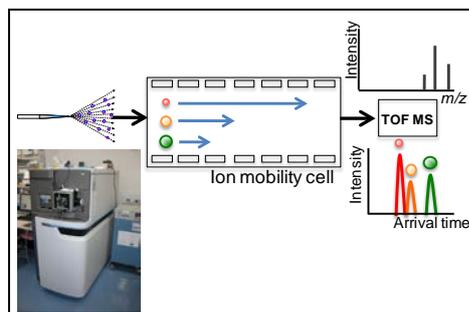
Analysis of solution structure of the histone H2A/H2B dimer

#### Calculation of corresponding structure to IM-MS results



Gas-phase structure of the H2A/H2B dimer

#### Ion mobility Mass Spec. Synapt G2 HDMS



IM-MS gives information on collision cross-section and  $m/z$  of the analyte