

第313回 化学科コロキウムのご案内 大学院英語化PT

「タンパク質の機能と構造の理解に対する計算化学的アプローチ」

講師： リントウルオト 正美 先生

（京都府立大学大学院生命環境科学研究科、准教授）

日時： 2022年 3月8日（火曜日）13:30 – 15:00

場所： ZOOM開催

要旨

計算化学的手法を用いることによって静的、動的な構造と機能の関連性の解明を目指している。今回は分子動力学法を用いた例について報告したい。膜貫通たんぱく質CD44はヒアルロン酸HAを介した細胞ローリングにおいて重要な役割を果たす。血流下におけるせん断応力をアロステリック因子とするHA結合—解離を繰り返す機構が提案されている。分子動力学法を用いることでこの機構の詳細について検討を行った。また、セリンプロテアーゼであるニューロプシンの活性および基質特異性を決定する因子を分子動力学計算の結果より提案している。以上について報告する。

連絡先 東京都立大学 理学研究科 化学専攻 波田雅彦 内線3583 hada@tmu.ac.jp