



第3回ピコバイオロジー研究会

生体分子構造ダイナミクスの統合モデリング

日時： 2022年1月21日(金) 16:00–17:00

場所： WebEX 下記 URL

https://hyougo-u.webex.com/meet/koto_k045

演者： 松永康佑 (埼玉大学大学院理工学研究科)

要旨： タンパク質の機能と関わる構造ダイナミクスを理解するために、構造の計時変化を詳しく観測することは重要である。構造ダイナミクスを「直接」観測する手法として1分子計測は非常に強力であるが、一般に得られる構造の解像度が低いという弱点がある。一方で全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションでは、原子レベルの機能ダイナミクスを観察することができるが、現象によってはモデルパラメータが不正確で正しくないという弱点がある。そこで我々は、統計数理の手法を応用することで、1分子計測・シミュレーション双方のデータを相補的に組み合わせて同化・統合し、高解像度な機能ダイナミクスを調べる手法を開発・応用してきた [1]。講演ではこれまでに行った1分子 FRET 計測データへの応用研究 [2] や、現在行っている高速原子間力顕微鏡データに対する途中結果を紹介する。

[1] Y. Matsunaga and Y. Sugita, *Curr. Opin. Struct. Biol.* 61, 153-159 (2020)

[2] Y. Matsunaga and Y. Sugita, *eLife* 7, e32668 (2018)

主催 : バイオダイナミクス研究センター

世話人: 生体物質構造学 II 分野 久保 稔