

理工学研究科 物理学専攻 オリエンテーション
大学院新入生歓迎講演会・懇親会

6月29日（金）17:10 ～ 20:00

第1部：講演会

講師：光武亜代理 准教授

題目：物理化学の理論を駆使したタンパク質の分子シミュレーション

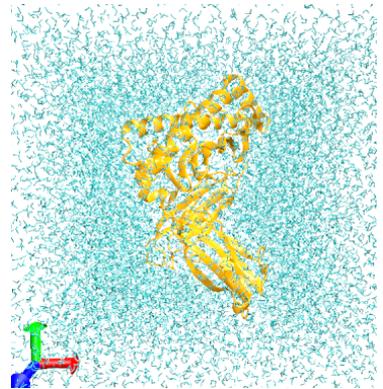
時間：17:10 ～ 18:30

場所：A303 教室

概要：タンパク質は、20種類のアミノ酸がペプチド結合でつながった一本鎖の高分子です。アミノ酸配列によりタンパク質の立体構造や機能が特徴づけられます。複雑な分子ですが、生理的条件下では約100残基程度のものは自発的に一つの立体構造（天然構造）に巻き戻ります。また、タンパク質同士で相互作用したりすることにより、タンパク質の機能が生じることがあります。化学物理の視点でこれらの機構を理解することは非常に面白いです。

これまで、化学物理の理論に基づく分子シミュレーション手法の開発を行ってきました。分子シミュレーションは、粒子の運動方程式（微分方程式）を数値的に解くことにより、粒子の座標と運動量の時間発展を追う方法です。生体高分子の構造安定性、ダイナミクスや機能について分子レベルで調べることができる強力な手法です。いろいろな研究者の研究から、分子間に働く相互作用を正確に取り入れられるようになってきており、また、計算機の発展により、大規模で長時間の計算が可能になってきました。最近では、実験と比較できる程度の時間スケールまで長時間の分子シミュレーションが可能となってきています。

本講演では、タンパク質分野での分子シミュレーションの現状と、簡単に自身の研究について紹介します



図：リボン表示のタンパク質（オレンジ）と周りの水分子（水色）

第2部：懇親会

時間：18:30 開始

場所：食堂館スクエア 21（2階）HILLS

講演会・懇親会とも、院生・学部生どなたでも参加できます

問い合わせ先：金本 (kanamoto@meiji.ac.jp)