苙口 友隆（おろぐち ともたか）

【研究課題名】X 線回折散乱実験と分子シミュレーションを用いた生体分子の動的構造の解析

慶應義塾大学理工学部物理学科 助教

【E-mail】oroguchi@phys.keio.ac.jp

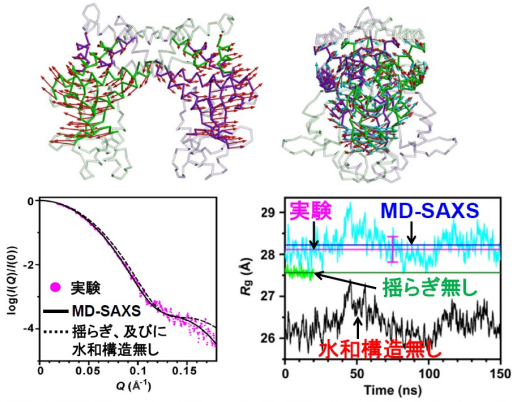
【専　門】生物物理

【キーワード】生体分子ダイナミックス・水和、X 線溶液散乱、X 線ナノイメージング

溶液 X 線散乱と新しい分子シミュレーション手法を組み合わせることで、溶液中における生体分子の柔らかさを解析します。酵素から天然変性蛋白質まで様々な柔らかさを持つ生体分子を対象とすることで、柔らかさと機能の相関について統合的な理解を進めます。

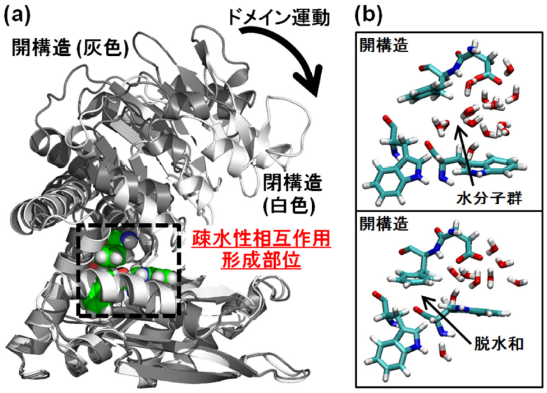
〈研究グループアクティビティー〉

溶液中における生体分子の柔らかさを実験と計算の併用により解析



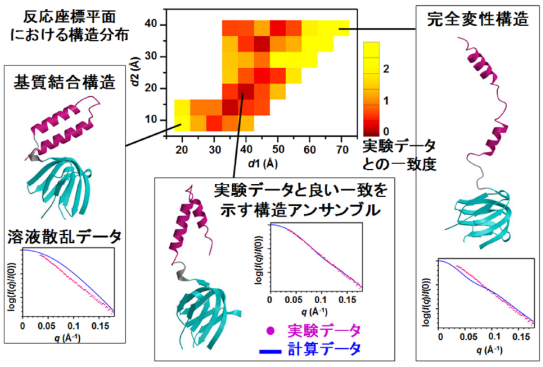
溶液X線散乱と分子動力学計算により明らかになった、制限酵素EcoO109Iの機能的動き構造揺らぎ

生体分子ダイナミックスと水和構造の相関解析



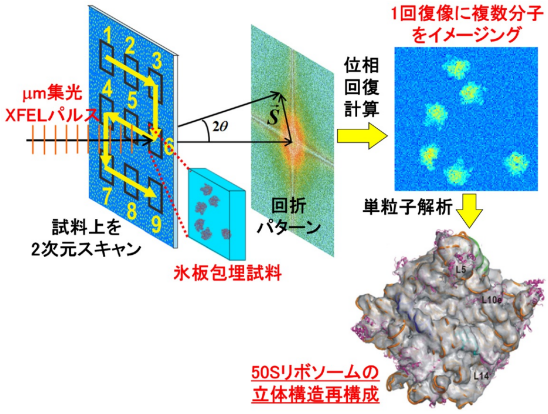
酵素のドメイン運動(a) と、それに伴う水和構造変化(b)

天然変性蛋白質の基質結合に伴う立体構造形成過程の解析



F1-ATPase εサブユニットのATP結合に伴う立体構造形成機構の解明

コヒーレントX線回折イメージングによる三次元構造解析法の開発



Tomotaka Oroguchi

【Research Subject】 Protein functional dynamics investigated by X-ray solution scattering experiment and molecular simulation

Assistant Professor

Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Keio University

【E-mail】 oroguchi@phys.keio.ac.jp

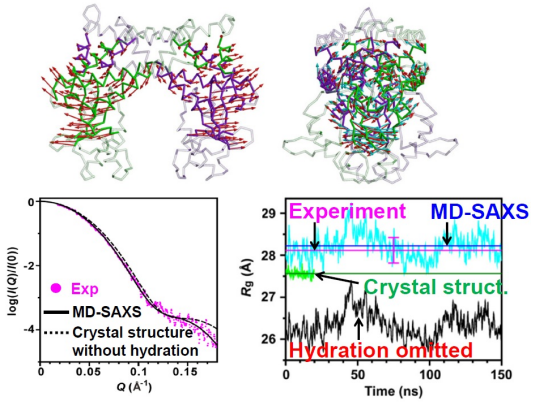
【Speciality】 Biophysics, Computational Biology, X-ray imaging

【Keywords】 molecular Simulation, protein dynamics, hydration structure, X-ray solution scattering, X-ray diffraction

We will investigate protein functional dynamics in solution by combination of X-ray scattering experiments and molecular simulations.

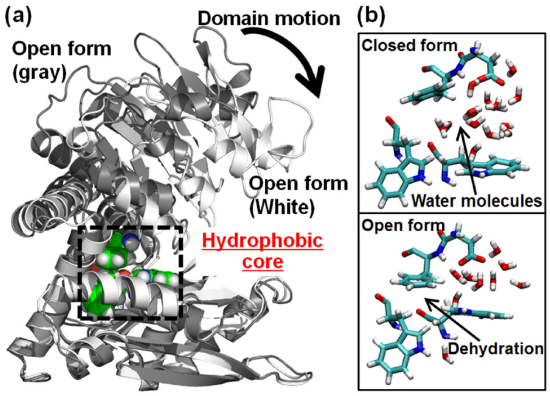
Research Group Activity

Protein dynamics in solution investigated by MD and SAXS



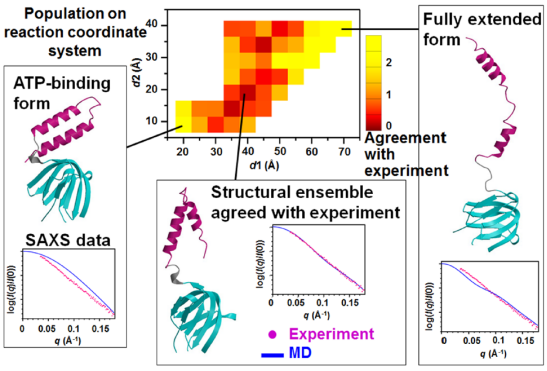
Functional domain motion of restriction endonuclease revealed by MD-SAXS method

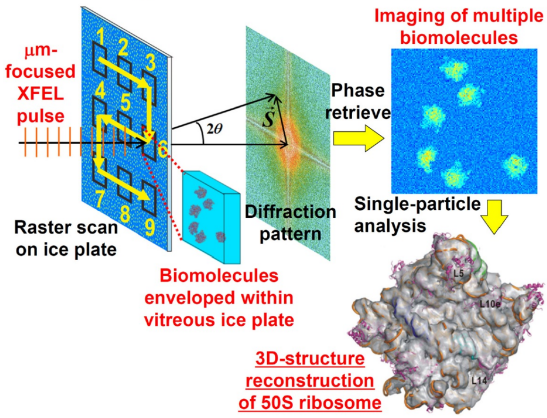
Correlation between protein dynamics and hydration water



(a) Domain motion of GDH, and (b) dehydration associated with domain closure motion

Coupled and folding mechanism of intrinsically disordered protein



Folding of F1-ATPase ε subunit induced by ATP binding (MD and SAXS analyses)

Development of structural analysis method by coherent X-ray diffraction imaging