

課題名 (タイトル) :

生体分子の粗視化シミュレーション技術の開発

サブテーマ 1 :

生体分子粗視化モデルの開発と応用

利用者氏名 : ○木寺 詔紀*, 高田 彰二**

所属 :

*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム・分子スケール研究開発チーム

**京都大学理学研究科生物科学専攻生物物理学教室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

背景: ロドプシンは光受容体であり、G 蛋白質共役型受容体 (GPCR) である。ロドプシンは、色中心であるレチナールと、アポ蛋白質であるオプシンからなる。レチナールはオプシン部分の Lys296 と共有結合しており、その結合部においてシッフ塩基を成している。暗黒状態において、レチナールは 11 シス構造を取っており、光を吸収するとオールトランス構造に光異性化する。レチナールの構造変化により、シッフ塩基のプロトンがオプシン部分の Glu113 に移動し、これによりオプシン部分の構造変化が引き起こされる。プロトン移動が起こる前の状態を Metarhodopsin I (Meta I)、プロトン移動が起こった後の状態を Metarhodopsin II (Meta II) と呼ぶ。オプシン部分の構造変化により、ロドプシンは G 蛋白質活性化能力を得る (Meta II*)。以降、オプシン部分の構造変化が起こった後の状態について (すなわち活性状態について)、* をつけて表現する。

ロドプシンは光情報を神経信号に変換する初期段階を担っており、その活性化過程に興味を持たれている。さらに、ロドプシンは GPCR の代表として研究が進められており、創薬の観点から活性状態の構造を得ることが期待されてきた。活性状態のオプシン (Ops*) 結晶構造が得られたことにより、オプシン部分の構造変化に関しては理解が進んだ。一方で、レチナールの構造変化に関しては論議が続いており、決着がついていない。NMR を用いて各残基、レチナール炭素間の距離情報を抽出した実験では、活性化過程においてレチナールの回転は

なく、細胞外ループ (EL)2 の構造変化によりオプシン部分全体の構造変化が引き起こされると結論付けている。一方で、Ops* の結晶構造では EL2 の構造変化は起こっておらず、オプシン部分の活性化に EL2 の構造変化が必要であると結論付けることはできない。

近年、Meta II* の結晶構造に関連する論文が 2 つ同時に発表された。一方は、オプシン結晶をオールトランスレチナール溶液に浸すことによって得られた構造であり、レチナールの回転を示唆している。他方は、構成的活性を持つ Glu113 変異体の結晶構造であり、レチナールの回転は起こっていない。これら 2 つの構造はどちらも特殊な環境で得られたものであり、議論の余地がある。また、最近発表された構成的活性を持つ Met257 変異体の結晶構造では、再びレチナールの回転が示唆されている。

目的: そこで我々は、分子動力学シミュレーションを用いて、ロドプシン活性状態におけるレチナールの回転について調べることにした。分子動力学シミュレーションと NMR 実験を組み合わせレチナールの構造を予測した研究は存在するが、これらはシミュレーション中に強制的な力をかけているため恣意性を排除できない。そこで我々は、シミュレーション中に強制的な力をかけず、 μ 秒程度のシミュレーションを行うことによって恣意性を排除することにした。ロドプシンの μ 秒程度のシミュレーションとしては、Meta I を予測した研究結果が存在し、シミュレーション設定はこれに類似している。

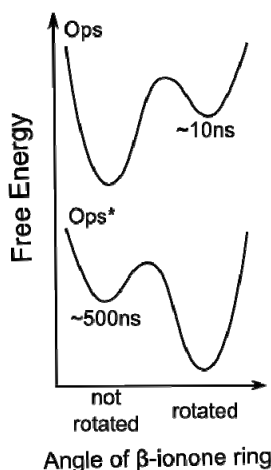
2. 具体的な利用内容、計算方法

初期構造：脂質二重膜は 1-stearoyl-2-docosahexaenoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (SDPC) を用いた。ロドプシンの結晶構造としては、暗黒状態 (PDB:1U19)、Lumi (PDB:2HPY)、Ops* (PDB:3DQB)、Meta II* (PDB:3PX0、2X72) を用いた。ロドプシンの Cys322、Cys323 にパルミチンを結合させた。

プロトネーション状態：プロトン移動前の状態 (暗黒状態、Lumi) では Glu113 を脱プロトン化状態、Schiff 塩基をプロトン化状態とし、プロトン移動後の状態 (Meta II、Meta II*) では Glu113 をプロトン化状態、Schiff 塩基を脱プロトン化状態とした。また、オプシンの構造変化前の状態 (暗黒状態、Lumi、Meta II) では Glu134 を脱プロトン化状態とし、オプシンの構造変化後の状態 (Meta II*) では Glu134 をプロトン化状態とした。Asp83、Glu122 はプロトン化状態とし、その他のアスパラギン酸、グルタミン酸は脱プロトン化状態とした。ヒスチジンは全て δ 位がプロトン化した状態とし、Cys110 と Cys187 はジスルフィド結合させた。

シミュレーション設定：〈力場・ソフトウェア〉レチナールを含むロドプシンの力場として CHARMM22、脂質の力場として CHARMM27 を用いた。計算ソフトウェアは NAMD を用いた。全ての化学結合長は SHAKE によって固定され、タイムステップを 2fs とした。静電相互作用としては、Particle Mesh Ewald 法を用いた。NPAT アンサンブルを用い、温度は 310K、圧力は 1atm とした。〈計算時間〉暗黒状態 (100ns)、Meta II* 状態 (100ns \times 2 \cdot 1000ns \times 2 \cdot 500ns)、Meta II 状態 (1700ns \cdot 100ns) の計算を行った。

3. 結果



シミュレーション結果は、ロドプシン活性過程においてレチナールが回転することを支持した。従って、Meta II* 状態においてレチナールは、Lumi 状態のそれに対して 180 度回転した構造を

取っていることがわかった。一方で、Meta II 状態において β イオノンリングの回転が起こらないことも示唆した。これにより、 β イオノンリングの回転がオプシン部分の構造変化後に起こることが予測され、ロドプシン活性化におけるレチナールの構造変化に対してより詳細な知見を得られた。

4. まとめ

5. 今後の計画・展望

ロドプシン活性過程におけるレチナールの構造変化について、より詳細な知見を得ることができたが、その構造変化がオプシン部分にどのように伝わっていくのかについては十分理解が進んでいない。そこで、今後はオプシン部分の構造変化がどのようなプロセスで進んでいくのかについて研究していくつもりだ。その後、レチナールの構造変化がオプシンの構造変化にどのような影響を与えるのかについて、メタダイナミクスのような統計的な計算手法を用いて取り組んでいく予定である。これによりロドプシンの構造変化に対してだけでなく、GPCR 全体の構造変化に対するより詳細な知見が得られるはずである。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由なし

8. 利用研究成果が無かった場合の理由なし

課題名 (タイトル) :

生体分子の粗視化シミュレーション技術の開発

サブテーマ 2 :

キネシン分子モーターの一方向性の運動発現機構の粗視化シミュレーションによる研究

利用者氏名 : ○木寺 詔紀*, 金田 亮**

所属 :

*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム・分子スケール研究開発チーム

**京都大学理学研究科生物科学専攻生物物理学教室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

背景: キネシンは ATP 加水分解反応で得られた化学的なエネルギーを効率良く利用し、微小管上に沿った processive でかつ一方向性のある運動を実現する分子モーターである。特に双頭キネシンモーター(Kinesin-1)は、二つのヘッドを交互に動かす事であたかも人間が歩く様にして一方向に進み、タイトな化学-力学カップリングを実現する。キネシン上で起こる化学反応のうち、微小管との相互作用によって特に影響を受けるのは、ADP ヌクレオチドの放出過程と ATP ヌクレオチドの結合過程である。キネシンはこれらのヌクレオチドの結合解離のタイミングを巧みに調整する事で、固い mechano-chemical coupling (効率的な歩行運動) を実現している。しかし、一体どの様にして微小管との相互作用がキネシンの触媒機能の向上に寄与しているのか、その詳細メカニズムについては不明である。それは、キネシン-微小管複合体の X 線結晶構造が未だに存在しない為である。(キネシンの 2 つのヘッド間の内部張力がキネシンの活性部位に影響を与える仕組みが分かっていない事もこの問題を難しくしている。)

目的: 本研究の目的は、様々なヌクレオチド状態におけるキネシン-微小管複合体の界面構造を特定する事である。正確な界面構造を得る事でキネシンがその歩行中にどの様にキネシン-微小管間の相互作用の強度を切替えているのか知見を得る。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ヌクレオチドフリー状態やその他の状態におけるキネシンの単体構造と微小管(α , β -チューブ

リン)の構造を、電子顕微鏡像(cryo-EM map)に rigid-body フィットさせる事で様々なヌクレオチド状態におけるキネシン-微小管の複合体モデルを作成した。その複合体モデルを初期構造として Gromacs による全原子 MD(explicit-solvent、イオン強度 80mM)を行い、キネシン-微小管間の界面構造のリファイメントを遂行した。リファイメント MD の初期段階においては、一部のループ領域(L11, L12, P-loop)を除く殆ど全ての領域の主鎖に対して位置拘束を付与し側鎖のリファイメントを行った。その後、キネシンと微小管の境界領域の主鎖の位置拘束を解いて一定時間の MD を続行し複合体構造全体のリファイメントを行った。最適な複合体構造の特定(抽出)の際は、implicit-solvent モデルのエネルギー関数(GB/SA model)を適用した。

3. 結果

キネシン-微小管間の結合にとって重要な残基を特定する為に、全原子計算で得られたリファイメント構造に Implicit-solvent モデルを適用し、キネシン-微小管の界面に存在する各残基ペア毎の相互作用エネルギーを評価した。その結果、界面の相互作用エネルギーの高い残基は、過去の実験(alanine-scan)で重要であると示唆された残基と良く一致する事が確認された。この事は全原子計算で我々が得たリファイメント構造の妥当性を示すと考えられる。

4. まとめ

全原子 MD によりキネシン-微小管複合体のリファイメント構造を決定する事ができた。得られた複合体構造からキネシン-微小管の結合にとって重要な残基を特定する事に成功した。

平成 23 年度 RICC 利用報告書

5. 今後の計画・展望
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容
これまでの RICC の利用によりキネシン-微小管複合体のリファイメント構造を決定する事ができた。しかし、キネシンのヘッド間の内部張力がどの様にヌクレオチドの結合解離を制御(促進)しているのかは解明できていない。そこで、RICC を継続利用する際は、今回の全原子計算で得られた複合体のリファイメント構造を基に、cafemol を用いた粗視化シミュレーションを遂行し、ヘッド間の内部張力がヌクレオチド(ATP, ADP)の結合解離に及ぼす影響を調査する。
7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由
なし
8. 利用研究成果が無かった場合の理由
なし

課題名 (タイトル) :

生体分子の粗視化シミュレーション技術の開発

サブテーマ 3 :

DNA-タンパク質複合体の粗視化シミュレーション : ヌクレオソームのダイナミクス

利用者氏名 : ○木寺 詔紀*, 検崎 博生**

所属 :

*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム・分子スケール研究開発チーム

**京都大学理学研究科生物科学専攻生物物理学教室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

DNA は、核内でヌクレオソームという、ヒストン 8 量体に DNA が 2 回転程巻きついた構造で格納されている。また、ヌクレオソームは集まってフィラメント状の構造を取ることが知られている。一方、遺伝子が発現する際には、これらの構造をほぐして、DNA を RNA に転写する必要があり、その動的なふるまいを調べることは大変重要である。本課題では、DNA とタンパク質の粗視化モデルを用いて、ヌクレオソーム単体の構造ゆらぎを調べ、その後ヌクレオソームが複数集まったフィラメント構造について調べることを目的とする。

ヌクレオソーム単体のふるまいについては、近年、1 分子実験により、興味深い結果が得られており、シミュレーションでは、その実験結果を再現することによって、実験では分からないアミノ酸レベルのダイナミクスを調べる。また、ヌクレオソームのフィラメント構造は、巨大な系であり、大規模な計算パワーが必要とされる系となっている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

我々のグループで開発している、生体分子粗視化シミュレータ CafeMol を用い、今年度は、ヌクレオソーム単体のシミュレーションを中心に行った。具体的には、(i)平衡状態でのヌクレオソームのゆらぎを調べる計算を行い、(ii)ヌクレオソームを力学的に引っ張りアンジッピングさせる、

動的なシミュレーションを行った。

3. 結果

ヌクレオソームの単体の平衡シミュレーションの結果、DNA の両端が半回転ほどゆるぐことが分かり、これは実験結果と対応していた。また、アンジッピングシミュレーションでは、DNA がほぐける過程で 2 ヶ所で大きなピークがあらわれるという実験結果を再現することができた。

4. まとめ

ヌクレオソーム単体の平衡的なゆらぎと、動的な構造変化のシミュレーションを行った。結果は、1 分子実験で得られているものと定性的に一致するものであった。

5. 今後の計画・展望

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

今年度はヌクレオソーム単体の系のシミュレーションを中心に行ったが、来年度は、ヌクレオソームが 20 個までのシミュレーションを行いたいと考えている。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由なし。

8. 利用研究成果が無かった場合の理由
なし。

課題名 (タイトル) :

生体分子の粗視化シミュレーション技術の開発

サブテーマ 4 :

Functionally rotating mechanism of a multidrug transporter studied by coarse-grained simulation

利用者氏名 : 〇木寺 詔紀*, Xin-Qiu Yao **

所属 :

*社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム・分子スケール研究開発チーム

** Dept Biophys, Grad Sch Sci, Kyoto U

1. Introduction

Multidrug resistance is a serious problem in current chemotherapy. The efflux system largely responsible for the resistance in *E. coli* contains the drug transporter, AcrB. The crystal structures of AcrB suggest a functionally rotating mechanism, which was confirmed by our computer simulations. However, many questions are still remained. For example, how does drug enter AcrB is still a mystery due to the difficulty of *in vitro* experiment. In this work, we studied the problem of drug uptake in AcrB by calculating the free energy profiles of binding.

2. Methods

Structure-based two-bead model of protein was employed, with model parameters assigned by the atomic-interaction-based coarse-grained (AICG) method. The drug was essentially considered a rigid linear chain, associated with two adjustable parameters indicating the strength of interaction between drug and protein (c_P) and between drug and membrane (c_M), respectively. Same energy function as before was used for the hydrophobic interaction between drug and protein, and a simple one-dimensional square-well potential was developed for the drug-membrane association. All the methods were implemented in CafeMol. We performed umbrella sampling for the drug binding along the tunnels in AcrB trimer, and calculated the potential of mean force by the weighted histogram

analysis method (WHAM).

3. Results and Conclusion

In AcrB, there are two obvious tunnels serving as possible drug binding pathways: One opens at a position close to the surface of the membrane (denoted by “vestibule path”) and the other opens much farther away from the membrane (“cleft path”). The free energy profiles of drug uptake showed evident dependence of the dominant binding pathway on the property of the drug. As shown in Fig. 1, drugs with large c_P and c_M mainly used the path that goes by the “vestibule” of AcrB. On the contrary, drugs with small c_P and c_M tended to choose the path going through the “cleft”. However, we note that in this study the AcrA molecule was not considered. The cleft pathway might be blocked by the docking of AcrA onto AcrB.

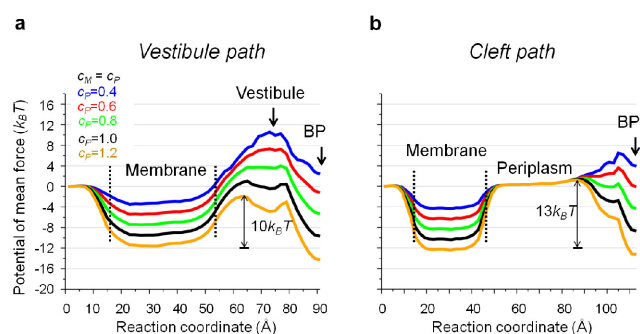


Figure 1. Free energy profiles of drug uptake along different paths

5. Future Plan

The drug-dependent binding mechanism of AcrB will be confirmed by large-scale dynamics simulations exploring a broad range of parameter sets for the c_P and c_M . To evaluate the c_M value of various drugs, we are also going to calculate the lipid/water partition coefficient of drugs using atomistic MD simulations.

課題名 (タイトル) :

生体分子の粗視化シミュレーション技術の開発

サブテーマ 5 :

タンパク質-RNA 複合体の粗視化分子シミュレーション手法の開発

利用者氏名 : ○木寺 詔紀, 堀 直人

所属 :

社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム・分子スケール研究開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、様々な機能性 RNA 分子やタンパク質-RNA 複合体の細胞内での重要な役割が明らかになりつつある。タンパク質と同様、これらのダイナミクスを調べるには分子動力学計算が適しているが、広範囲な時間/空間スケールに対する計算を行うためには、全原子モデルと粗視化モデルを組み合わせたマルチスケールな計算手法が必要である。申請者は、生体分子粗視化シミュレーションソフトウェア CafeMol の開発に携わっており、RNA の粗視化モデルを開発することで、大規模なタンパク質-RNA 複合体構造・機能相関を明らかにすることを目指している。

機能を持つ大規模タンパク質-RNA 複合体の好例はリボソームである。リボソームは因子結合状態や構造を様々に変化させながら遺伝情報翻訳を行うことが分かっている。近年それら機能的中間状態に対応する結晶構造がいくつか報告されているが、“動き”に関しては未解明な点が多く、分子シミュレーションの適用が期待される。特にトランスロケーションと呼ばれる反応に着目した。翻訳中に、新しいアミノ酸のペプチド転移反応が終わると、次のアミノ酸付加サイクルへ進むために、A および P サイトにある二つの tRNA が、P および E サイトへとそれぞれ移動しなければならない。メカニズムの詳細は未解明であるが、リボソームが回転運動することや、tRNA が二つのサイトにまたがった“ハイブリッド状態”をとることが実験から示唆されている。

本年度は、前年度に引き続き粗視化モデルパラメータの最適化を行ったのち、得られたモデルを

上述のリボソーム翻訳伸長時の挙動解析に適用して研究を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

RNA および RNA-タンパク質複合体に適用できる粗視化パラメータを得るために、分子動力学計算ソフトウェア Amber を用いて全原子シミュレーションを行う。その結果から得られた揺らぎの情報を用いて、CafeMol を用いた学習計算により粗視化モデルのパラメータを算出する。

リボソームの計算に関しては、サブユニットの回転前後に対応する結晶構造を用い、一つまたは二つの tRNA 結合サイト(A サイト・P サイト)に tRNA を配置する。サブユニット回転と tRNA アクセプターステム部分の挙動の関係性について調べるため、各配置での温度一定の MD 計算、および独自に定義した座標軸に沿ったアンブレラサンプリング法による自由エネルギー計算を行う。

3. 結果

前年度に、二重らせん形や tRNA などを含む 16 の RNA 分子および 4 つの RNA-タンパク質複合体の全原子計算の結果からモデルパラメータを算出していた。今年度は、さらに 4 つの RNA 分子および 6 つの RNA-タンパク質複合体に関して計算を行い、モデルの一般性を高めるよう努めた。具体的には、各々について 20ns、300K での全原子分子動力学計算を行い、粗視化粒子の結合長・結合角などに対応する量の揺らぎ度合い (MSF; Mean square fluctuation) を求めた。次に、CafeMol を用いて同じ分子に対する粗視化シミュレーションを行った。

ュレーションをおこない、MSF の値が全原子由来の値に一致するように粗視化力場パラメータの強度最適化を行った。各分子に対して得られたパラメータを平均化し、汎用パラメータとした。得られたパラメータを用いた検証計算の結果、全原子シミュレーションまた X 線結晶構造の温度因子から見積もられる揺らぎ具合を概ねよく再現していることが確認された。天然構造の安定性がやや過大評価される傾向があり改良の余地が残るものの、特定の構造の周りでの揺らぎを調べる上では十分利用できるものであると考えた。そこでリボソーム/tRNA 複合体への応用に着手した。

A サイトおよび P サイトに配置した tRNA の挙動のリボソームサブユニットの回転前後での変化、特に tRNA の Elbow から CCA-end (Fig1 参照) にかけて部分が隣のサイトへ傾くかどうかを調べた。本計算では tRNA の Anti-codon 側は mRNA との相互作用が強いためほとんど動かない。サブユニットの回転前後それぞれで、50S axis 座標上の位置を変数としてアンブレラサンプリングすることで自由エネルギーを計算することができ、回転が起きると Elbow や CCA-end が一つ隣のサイトへ倒れこんだ“ハイブリッド状態”がより安定となることが分かった。拘束のない 300K の MD 計算でも、同様に、回転後において tRNA のハイブリッド状態形成が観察された。

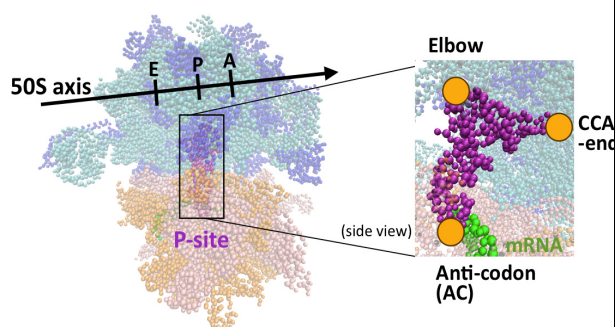


Fig. 1 リボソームのPサイトにtRNAを配置した初期状態の例。50S axis を図のようにリボソーム大サブユニット上に定義し、tRNA の Elbow や CCA-end の軸方向の動きに着目した。(青: 50S(大)サブユニット、赤: 30S(小)サブユニット、紫: tRNA、緑: mRNA)

4. まとめ

前年度と合わせて 20 の RNA 分子および 10 の

RNA-タンパク質複合体分子をターゲットに、全原子分子動力学計算に基づいたパラメータの推定を行ったことにより、精度よく揺らぎの大きさを再現しつつ、計算効率の高い粗視化モデルを構築できた。また、それを実際の巨大複合体の系であるリボソームに適用し、特に翻訳伸長サイクルでの tRNA の振る舞いに着目して解析を行った。その結果、リボソームのサブユニット回転が tRNA のハイブリッド状態形成に寄与していることが分かった。

5. 今後の計画・展望

本粗視化モデルは、特定の天然構造に依拠したモデルでありその周りでの揺らぎをよく表現している。しかしながら、例えばリボソーム複合体での二つの tRNA のような、非結合状態の分子間の相互作用の取扱いには改良の余地がある。特に、静電相互作用が振る舞いに大きく影響する可能性があるため、溶媒(特に陽イオン)の効果をより顕に考慮したモデルなどを試したい。

リボソーム翻訳伸長メカニズムについては、tRNA のハイブリッド状態形成までは再現することが分かったので、その後、隣のサイトへの移動が完了するまでの過程を引き続き調べる必要がある。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容
RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

これまで、全原子分子動力学計算のほとんどの部分を RICC で行った。また粗視化シミュレーションの多くの部分も RICC を用いた。リボソームの系への応用では、自由エネルギー計算に必要なサンプリングを RICC で行った。

継続して利用できた場合には、計画・展望に述べたとおり、粗視化モデル中での静電相互作用の取扱いを改良したく、近年提案されたイオンを顕

平成 23 年度 RICC 利用報告書

に取り入れるモデルや、仮想的に Mg を配置するモデルなど、いくつかの手法を試して検討する。

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Hiroo Kenzaki, Nobuyasu Koga, Naoto Hori, Ryo Kanada, Wenfei Li, Kei-ichi Okazaki, Xin-Qiu Yao, and Shoji Takada, **CafeMol: A Coarse-Grained Biomolecular Simulator for Simulating Proteins at Work**, J. Theor. Chem. Theory Comput. 7, 1979-1989 (2011)

【国際会議などの予稿集、proceeding】

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Coarse-grained molecular simulation study of ribosomal translocation dynamics

堀 直人、高田 彰二

第 49 回日本生物物理学会年会 2011 年 9 月 姫路

【その他】

A Coarse-Grained Simulation Study of Ribosome and tRNA Dynamics during Translocation

Naoto Hori and Shoji Takada

Biophysical Society 56th Annual Meeting 2012 年 2 月 米国・サンディエゴ ポスター発表

Fluctuations of Transfer RNAs in the Ribosome Cavity Studied by Coarse-Grained Simulations

Naoto Hori and Shoji Takada

The 5th International Symposium on Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions

2012 年 1 月 奈良 ポスター発表

Coarse-grained model of RNA-protein complexes derived by multiscale simulation method

Naoto Hori and Shoji Takada

The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" 2011 年

9 月 京都 ポスター発表

翻訳中のリボソーム複合体と tRNA のダイナミクス-粗視化分子シミュレーション-

堀 直人、高田 彰二

第 11 回日本蛋白質科学会年会 2011 年 6 月 大阪 ポスター発表

Ribosome and tRNA Dynamics during Elongation Studied by Coarse-Grained Molecular Simulations

Naoto Hori and Shoji Takada

The 16th Annual Meeting of the RNA Society 2011 年 6 月 京都 ポスター発表