

「フェリチン分子への多イオン透過過程におけるエネルギー障壁の計算」

講演者氏名	高橋 卓也
所属	計算科学研究センター
講演タイトル	「フェリチン分子への多イオン透過過程におけるエネルギー障壁の計算」
講演概略	金属貯蔵蛋白質フェリチンへの鉄イオン蓄積過程の解明のため、1価及び2価イオンの分子内部への移行に伴う静電自由エネルギー変化を計算した。実験で得られたイオンの位置や、アミノ酸残基置換の影響を計算によって再現することができた。