

研究者プロフィール

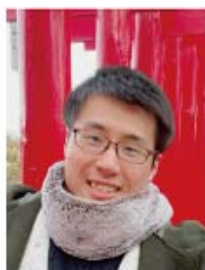
生物応用化学科 Dept. of Biochemistry and Applied Chemistry

—計算科学, 生物物理, 理論化学

Computational Chemistry, Biophysics, Theoretical Chemistry —

谷本 勝一 TANIMOTO Shoichi

研究業績 (論文・著書・その他の活動)



- [1] Tanimoto S. and Okumura H. *J. Comput. Chem., Jpn.* **22**, 18-20 (2023).
- [2] Tanimoto S., Itoh S. G., and Okumura H. *Int. J. Mol. Sci.* **23**, 10358 (2022).
- [3] Tanimoto S., Itoh S. G., and Okumura H. *Biophys. J.* **120**, 3615-3627 (2021).
- [4] Itoh S. G., Tanimoto S., and Okumura H. *Chem. Phys. Lett.* **778**, 138819 (2021).

タンパク質は主に 20 種類のアミノ酸が結合した生体高分子であり、生体内で適切に折り畳まれることで特有の立体構造を形成して機能を発揮する。その一方で間違って折り畳まれるとミスフォールディング病と総称される様々な神経変性疾患を引き起こす。代表的な疾患としてアルツハイマー病やハンチントン病が挙げられる。これらの疾患は間違って折り畳まれたタンパク質が凝集して球状の凝集体やアミロイドと呼ばれる針状の凝集体を形成することで引き起こされると考えられている。そのためこれらの疾病の治療のためには凝集体の形成を阻害する必要がある。私は分子動力学シミュレーションを用いた計算科学的手法により、神経変性疾患原因タンパク質の凝集体形成メカニズム及び薬剤候補化合物による凝集体形成の阻害メカニズムを解明することを目的に研究を行っている。

研究分野キーワード

神経変性疾患, アミロイド, 凝集阻害, 分子動力学シミュレーション, 拡張アンサンブル法