

武汉物数所理论交叉学术交流系列报告

(第一五五期)

Polarizable Force Field Development of Lipid Molecules and Their Applications



李国辉 研究员

大连化学物理所

2016年10月20日(周四)

下午 2:30-4:00

频标楼 4 楼报告厅

Abstract: Structure, dynamics and functions of membrane proteins are regulated precisely by their environments including lipids and membrane components. Point charge model of traditional force field cannot reproduce correct experimental measurements of ion conductance of membrane channels, for example, gramicidin A. This is a challenging problem for molecular modeling. AMOEBA force field is multipole expansion-based polarizable force field and has been approved to be accurate. The combination of AMOEBA with GPU and enhanced sampling algorithm has showed that the computational efficiency can be improved and used for large membrane proteins. We have developed and validated ANOEB force field for lipids and cholesterol. The application for ion conductance of gramicidin A showed that it can reproduce experimental results accurately and better than all other traditional point charge models. It has been used to study the functional mechanism of GLUT1 and other complicated membrane proteins.

报告人简介：李国辉，中科院大连化物所研究员、博士生导师，分子反应动力学国家重点实验室副主任。2000年获大连化物所博士学位。2000年-2006年先后在美国新墨西哥大学、威斯康辛大学、哈佛大学医学院从事博士后研究。2006年3月-2009年3月任美国 Biogen Idec Inc. 研究科学家。2009年3月获中科院“百人计划”择优支持。长期聚焦在生物分子结构与功能的动态模拟、机理解析以及理论预测等研究方向，发展了新的理论方法并开展了应用研究。在理论方法学方面，首次提出并建立了新型高精度粗粒化分子模型，大幅提高计算的同时仍然保持全原子计算精度；建立了细胞膜磷脂分子的高精度全原子可极化模型，实现了软硬件加速方案相结合的模拟新方法，并成功应用于膜通道蛋白离子导电性问题；发现了蛋白质振动熵全原子与粗粒化计算方法之间存在高度线性关系，并由此发展了快速准确计算蛋白质振动熵的理论方法。应用研究方面，利用不同尺度计算方法，解析了多种复杂生物酶工作的微观机理。理论预测方面，提出了新的计算策略，成功预测了重要蛋白质复合物的空间结构及生物活性小分子的新功能。近5年来，共发表SCI论文68篇，他引293次，包括Nature、Nature Commun、Chem Sci、J Am Chem Soc等国际一流杂志4篇，J Chem Theory Comput、J Comp Chem和PLoS Comp Biol等理论计算化学与计算生物学国际核心杂志8篇（2篇封面）。2013年被选为中国化学会生物物理化学专业委员会委员，被Scientific Reports等三个英文期刊聘为编委。获得第五届中国侨界创新人才贡献奖。2016年获得国家杰出青年科学基金项目资助。

主办单位：武汉物数所理论与交叉研究部