

## 大连化物所因公出访事后公示表

出访人团组成员基本信息：		
姓名	部门	职务
李国辉	1106	研究员
实际执行情况： 2019年5月11日从北京出到法国图卢兹 2019年5月12-17日法国图卢兹 残基第七届中法理论与计算化学研讨会 2019年5月17日-18日由法国图卢兹启程经北京返回大连		
经费开支情况： 国际机票33169元，境外支出320欧元。		
出访总结：  第七届中法理论与计算化学研讨会于2019年5月12日-17日在法国图卢兹举行，李国辉研究员应邀参加了该会议，并作题为《Multiscale modeling of dynamics and mechanism of functions of biomolecules》的邀请报告。报告中，李国辉研究员向与会者介绍了最近研究组多尺度分子动力学模拟方法在 Ribonuclease (RNase) P 应用体系上的研究进展。我们通过分子动力学模拟揭示了不同组成蛋白对于核酶自身不同部位的稳定性具有不同的作用；并结合 QM/MM/MD 模拟及自由能计算分析了 RNaseP 催化反应机理，提出了水分子介导的双镁离子催化的 SN2 反应模型，深入阐明了这一类古老核酶的催化微观机理。该研究工作不仅清楚地理解了真核生物 RNaseP 催化底物 tRNA 前体切割成熟的分子机制，也为了解以 RNA 为基础的核糖核蛋白复合体的催化共性、底物 tRNA 的分子识别机理		

及 RNA 核酶的生物进化过程提供了新的认知。报告得到了与会者的高度评价，特别是针对理论与实验的合作研究方向。通过前几届中法理论化学与计算研讨会于法国理论化学的学者建立了良好的合作关系，通过此次会议让大家对中法的理论合作更有信心。