

2. 自然科学

[数学]

研究概要

平坦トーラス上のカイラルアノマリーに関して, regular lattice に微小な擾乱を加えた場合を軸に計算を進める道筋を検討している。(渡辺)

レーヴナーの理論における積分表示の利用を試みて, 作用素単調関数の強さの考察を続けている. 作用素平均との関係も調べている。(儀我)

研究業績

論文

(1) 総説:

- 1) 渡辺 浩: 無限次元系と繰り込み群. 数理科学 2010 ; 559 : 7-12.

学会発表

(1) シンポジウム:

- 1) 渡辺 浩: 数理科学と数学教育. 「社会に数理科学を発信する次世代型人材創発」ラウンドアップフォーラム「新時代の数学教育像の形成を目指して」- 数学+哲学+歴史+教育 -, 2010. 3.

(2) 一般講演:

- 1) 儀我真理子: 素朴な感覚から入る数学教育. 数学教育の会 (東京), 2009. 9.

[物理学]

研究概要

物理学教室は, 現在, 教授, 准教授, 講師の3名で構成されており, 連携しながら生物物理の理論的な側面に関して研究を行っている. 今年度の研究内容は以下の通りである.

1. 分子軌道法を用いて, ミオシンの ATP 加水分解に伴う構造変化, リン脂質リボソームの相転移, 酸化チタンの触媒作用について理論研究を行っている. [香川]

2. 昨年度に引き続き, タンパク質の動的構造に着目しながら, 哺乳類とバクテリア由来のキサンチン脱水素酵素の研究を行っている. また, 香川教授とともに, ミオシンの ATP 加水分解機構の解明をするために, 新しい半経験的分子軌道法を用いてその電子状態の計算を行い, 従来の結果と比較検討した. [菊地]

3. 菊地准教授とともに, キサンチン脱水素酵素の分子動力学法を用いた理論研究を行っている. 今年度はあらわに基質 (フェブキソスタット) を入れた計算を行い, タンパク質の動的な構造が基質のダイナミクスに与える影響を明らかにした. また, 生体分子内のエネルギー移動ダイナミクス, 構造変化ダイナミクスの理論計算も行っている. [藤崎]

研究業績

論文

(1) 原著:

- 1) Kagawa H, Kikuchi H, Gao Q¹, Ogihara T² (1) Mitsubishi Chemical Group Science and Technology Re-

- search Center, Inc., ²⁾ Azabu University) : Molecular Orbital Study of the Interaction between MgATP and the Myosin Motor Domain Using the PM6 Method. J Comput Chem Jpn 2010 ; 9 : 37-42.
- 2) Ogihara T¹⁾, Kagawa H²⁾, Gao Q, Mori K³⁾ (¹⁾ Azabu University, ²⁾ Mitsubishi Chemical Group Science and Technology Research Center, Inc., ³⁾ WCSC) : A Study of the Molecular Structure of Phospholipids and the Aggregation of Liposomes Using the Molecular Orbital Method. J Comput Chem Jpn 2010 ; 9 : 43-46.
- 3) 森 和英¹⁾, 中野 隆²⁾, 松林雄一³⁾, 香川 浩 (¹⁾ WCSC, ²⁾ 東京工業大学大学院, ³⁾ 流通開発システム) : 酸化チタン表面の触媒活性中心モデル. J Comput Chem Jpn 2010 ; 9 : 29-36.

学会発表

(1) 一般講演 :

- 1) Hasebe N¹⁾, Yamashita N¹⁾, Karouji Y¹⁾, Hareyama M¹⁾, Hayatsu K¹⁾, Nemoto S¹⁾, Iwabuchi K¹⁾, Takeda Y¹⁾, Nagaoka H¹⁾, Tsukada K¹⁾, Okudaira O¹⁾, Sakurai S¹⁾, Komatsu S¹⁾, Shibamura E²⁾, Kobayashi M, et al. (¹⁾ Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ²⁾ Saitama Prefectural University) : Overview of Elemental Distributions on the Moon Observed by SELENE GRS. The 27th International Symposium on Space Technology and Science (Tsukuba), 2009. 7.
- 2) Karouji Y¹⁾, Hasebe N¹⁾, Yamashita N¹⁾, Kobayashi S¹⁾, Hareyama M¹⁾, Shibamura E²⁾, Kobayashi M, Okudaira O¹⁾, Ebihara M³⁾, Arai T⁴⁾, Sugihara T⁵⁾, Takeda H¹⁾, D'uston C⁶⁾, Gasnault O⁶⁾, Diez B⁶⁾, et al. (¹⁾ Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ²⁾ Saitama Prefectural University, ³⁾ Tokyo Metropolitan University, ⁴⁾ NIPR, Japan, ⁵⁾ JAMSTEC, Japan, ⁶⁾ Centre d' Etude Spatiale des Rayonnements, France) : Elemental Distribution in the Lunar Subsurface by the SELENE GRS Observation. The 72nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (Nancy, France), 2009. 7.
- 3) Hasebe N¹⁾, Shibamura E²⁾, Kobayashi M, Yamashita N¹⁾, Karouji Y¹⁾, Kobayashi S¹⁾, Hareyama M¹⁾, Komatsu S¹⁾, Hayatsu K¹⁾, Nemoto K¹⁾, Iwabuchi K¹⁾, Takeda Y¹⁾, Nagaoka H¹⁾, Tsukada K¹⁾, Machida J¹⁾, et al. (¹⁾ Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ²⁾ Saitama Prefectural University) : Lunar Gamma-Ray Observation by Kaguya GRS. The 6th Annual Meeting of the Asia Oceania Geosciences Society (Singapore), 2009. 10.
- 4) Karouji Y¹⁾, Hasebe N¹⁾, Yamashita N¹⁾, Kobayashi S¹⁾, Hareyama M¹⁾, Shibamura E²⁾, Kobayashi M, D'uston C³⁾, Mourice S³⁾, Gasnault O³⁾, Forni O³⁾, Diez B³⁾, Reddy R⁴⁾, Kim K⁵⁾, Ebihara M⁶⁾, et al. (¹⁾ Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, ²⁾ Saitama Prefectural University, ³⁾ Centre d' Etude Spatiale des Rayonnements, France, ⁴⁾ Planetary Science Institute, USA, ⁵⁾ Korea Institute of Geoscience and Mineral Resources, Korea, ⁶⁾ Tokyo Metropolitan University) : Possible Diversity of Elemental Composition in the Lunar Farside Highland Observed by SELENE GRS. The 6th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (Singapore), 2009. 10.
- 5) 香川 浩, 永井喜則¹⁾, 輪湖 博²⁾ (¹⁾ 国士舘大・情科センター, ²⁾ 早大・社会) : Relative Changes of Distances between Each Pair of Amino Acid Residues in Myosin Motor Domain during ATP Hydrolysis. 日本生物物理学会年会 (第47回) (徳島), 2009. 11.
- 6) 菊地浩人, 藤崎弘士, 古田忠臣¹⁾, 岡本 研²⁾, Leimkuler S³⁾, 西野武士²⁾ (¹⁾ 理研・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, ²⁾ 日医大・生化学第一, ³⁾ ボツダム大・生化学) : Significance of enzyme fluctuation in the lock-key mechanism between xanthine oxidoreductase and Febuxostat. 日本生物物理学会年会 (第47回) (徳島), 2009. 11.
- 7) 藤崎弘士, 志賀基之¹⁾, 木寺詔紀²⁾ (¹⁾ 原研・システム計算科学センター・マテリアルシミュレーション, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : Transition path sampling using the Onsager-Machlup action with replica ex-

change : Model calculations. 日本生物物理学会年会 (第47回) (徳島), 2009. 11.

- 8) 藤崎弘士, 菊地浩人, 古田忠臣¹⁾, 岡本 研²⁾, 西野武士²⁾ (1) 理研・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, ²⁾ 日医大・生化学第一) : Significance of enzyme fluctuation in the lock-key mechanism between xanthine oxidoreductase and Febuxostat. The 3rd International Symposium on Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions (Toyoda Auditorium, Nagoya University, Japan), 2009. 12.
- 9) 藤崎弘士, 志賀基之¹⁾, 木寺詔紀²⁾ (1) 原研・システム計算科学センター・マテリアルシミュレーション, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : Onsager-Machlup action-based path sampling and its combination with the replica exchange method. Workshop on dynamical systems theory and reaction (京都), 2010. 1.
- 10) 藤崎弘士, 志賀基之¹⁾, 木寺詔紀²⁾ (1) 原研・システム計算科学センター・マテリアルシミュレーション, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : Onsager-Machlup action-based path sampling and its combination with the replica exchange method. The 3rd International Symposium on Molecular Theory for Real Systems (京都), 2010. 1.
- 11) 藤崎弘士, 志賀基之¹⁾, 木寺詔紀²⁾ (1) 原研・システム計算科学センター・マテリアルシミュレーション, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : Sampling path ensembles using the Onsager-Machlup action with replica exchange : Model Calculations. アメリカ生物物理学会年会 (第54回) (San Francisco), 2010. 2.
- 12) 藤崎弘士, 志賀基之¹⁾, 木寺詔紀²⁾ (1) 原研・システム計算科学センター・マテリアルシミュレーション, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : Sampling path ensembles using the Onsager-Machlup action with replica exchange : Model Calculations. バイオスーパーコンピューティングシンポジウム (第2回) (東京), 2010. 3.
- 13) 松永康佑¹⁾, 藤崎弘士, 木寺詔紀²⁾ (1) 理研・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, ²⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : パスサンプリングによるタンパク質構造変化解析. 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2009 (東京), 2009. 10.
- 14) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士 (1) 九大箱崎・情報基盤研究開発センター) : 量子状態制御問題とカオス. 古典および量子ダイナミクス・非平衡統計力学に関するワークショップ (東大弥生講堂, 東京), 2010. 2.

[化学]

研究概要

菅原：アルカリ金属-ナフタレン錯体を用いたテルペン系化合物の合成及び、不飽和酸とジクロロカルベンへの反応によるジクロロシクロプロパンカルボン酸の合成。(1) 生理活性を有するラクトン類の合成。(2) カンファールなどの天然物ケトンを用いた不斉合成配位子の合成。

田中：質量分析計を用いた金属錯体の溶液内反応の研究。(1) 金属錯体で観測された選択的溶媒和に伴うプロトン、電子移動反応中性子放射化分析等による生体内微量元素等の研究。(1) 生体内微量元素等と疾患、環境等との関連。

永井：2, 2' -ビピリジンまたは1, 10-フェナントロリンを持つルテニウム (II) 混合配位子錯体の溶液化学。(1) 錯体の合成。(2) 高速液体クロマトグラフィーによる錯体異性体の分離およびその機構。(3) 錯体イオンの溶媒和に関する研究。(4) 錯体イオンの溶液内反応および平衡に関する研究。

武田：弱酸性陽イオン交換体を用いる無機イオンのクロマトグラフィーに関する研究。(1) 塩類水溶液系におけるアルカリ土類金属元素および希土類元素の吸着挙動と分離。(2) イットリウムの特異的分離とその機構の解明。(3) ジルコニウム (IV), ハフニウム (IV), および他の金属の三成分分離貴金属元素の分離および定量に関する研究。(1) 種々の陰イオン交換樹脂に対する貴金属元素の吸着および脱着挙動とその機構。(2) 陰イオン交換樹脂を用いる貴金属元素の分離および定量。