

2. 自然科学

[数学]

研究概要

素粒子に関する古典論的保存則が量子効果によって破れる現象を Ginsparg-Wilson fermion に対して考察し、数学的に厳密にアノマリーを導出する試みを続けている。また数学教育の今後の動向に関するシンポジウムにおける講演などをもとに、数理科学の現状と将来に関する試論を総説としてまとめた。(渡辺) 作用素不等式と majorisation という概念の間にもっと関係が付けられるのではないかを考えている。また、ピタゴラスの定理の拡張の形を作り、それを使って三角不等式の逆不等式を構成した。(儀我)

研究業績

論文

(1) 総説:

- 1) 渡辺 浩: 数学, 自然, コンピューター, 日本医科大学基礎科学紀要 2010: 40: 55-81.

学会発表

(1) ワークショップ:

- 1) Giga M: Reverse Inequalities. The Fifth Asia Regional Conference on Mathematics Education (5回) (Tokyo), 2010. 8.

(2) 一般講演:

- 1) Giga M: Reverse Inequalities. The Fifth Asia Regional Conference on Mathematics Education (5回) (Tokyo), 2010. 8.
- 2) 渡辺 浩: 医師としての人格を育む教養教育の試み, 日本医学教育学会 (7回) (東京), 2010. 7.
- 3) 渡辺 浩: 医科大学における数学教育, 数学教育の実現可能な真の理想の実現に向けての諸課題の検討 (東京), 2011. 2.

[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. 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、その他の生体分子について、半経験的な分子軌道法を用いて研究を行っている。特にATP加水分解に関しては、菊地准教授、藤崎講師らとともに反応経路計算も行っている。(香川)

2. 昨年度に引き続き、キサンチン酸化還元酵素の分子動力学による研究を行っており、現在論文を執筆中である。また、香川教授とともにミオシンの加水分解反応の研究も行っている。藤崎講師とは科研費基盤Cの助成を受けて、量子ダイナミクスの計算を共同で行っている。(菊地)

3. 生体分子の量子ダイナミクスに関する理論研究で代表者として科研費基盤Cの助成を受けており、その研究を推進している。また、パスサンプリングに関する新しい方法論(Onsager-Machlup法とストリング法、それぞれの発展形)を考案し、そのテスト計算やタンパク質への応用計算を行っている。(藤崎)

研究業績

論文

[追加分]

追加分研究報告書：

- 1) 永井喜則¹⁾, 香川 浩²⁾ (¹⁾ 国士館大学, ²⁾ 日本医科大学) : 分子軌道の大局的性質と局所的性質の関係. 国士館大学情報科学センター紀要 2010 : (31) : 80-84.

(1) 原著：

- 1) Fujisaki H^{1, 2)}, Shiga M³⁾, Kidera A^{2, 4)} (¹⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ²⁾ Molecular Scale Team, Integrated Simulation of Living Matter Group, Computational Science Research Program, RIKEN, ³⁾ Center for Computational Science and E-Systems, Japan Atomic Energy Agency (JAEA), ⁴⁾ Department of Supramolecular Biology, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University) : Onsager-Machlup action-based path sampling and its combination with replica exchange for diffusive and multiple pathways. J Chem Phys 2010 : 132 (13) : 134101-1-134101-8.

(2) 総説：

- 1) 藤崎弘士¹⁾ (¹⁾ 日本医科大学) : 生体分子におけるパスサーチおよびパスサンプリングについて. 日本医科大学基礎科学紀要 2011 : (40) : 83-98.

(3) 研究報告書：

- 1) Nagai Y¹⁾, Kito M¹⁾, Kagawa H²⁾, Maddess T³⁾ (¹⁾ Center for Information Science, Kokushikan University, ²⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ³⁾ School of Biological Sciences, Australian National University, Center for Visual Sciences, Eccles Institute of Neuroscience, ARC COE Vision Science) : A Quantum Chemical Study on the Retinal of Squid Rhodopsin. 国士館大学情報科学センター紀要 2011 : (32) : 20-31.
- 2) Nagai Y¹⁾, Kagawa H²⁾, Wako H³⁾ (¹⁾ Center for Information Science, Kokushikan University, ²⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ³⁾ School of Social Sciences, Waseda University) : How Can We Speculate Chemical Reaction Mechanisms of Macromolecules Using Molecular Orbitals?. 国士館大学情報科学センター紀要 2011 : (32) : 78-82.
- 3) 藤崎弘士¹⁾ (¹⁾ 日本医科大学) : 生体分子における振動状態の量子ダイナミクスについて. 国士館大学情報科学センター紀要 2011 : (32) : 62-67.

学会発表

(1) 一般講演：

- 1) 香川 浩¹⁾, 永井喜則²⁾, 輪湖 浩³⁾ (¹⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ²⁾ Center for Information Science, Kokushikan University, ³⁾ School of Social Sciences, Waseda University) : Structure Deviation Analysis of Proteins Complexed with Various ATP Analogs. International Conference on Bioinformatics (InCoB2010) (Tokyo, Japan), 2010. 9.
- 2) 藤崎弘士¹⁾, 志賀基之²⁾, 木寺詔紀³⁾ (¹⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ²⁾ 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, ³⁾ 横浜市大・生命ナノ・生体) : A multi-scale approach for path sampling. アメリカ生物物理学会 (第55回) (Baltimore), 2011. 3.
- 3) 香川 浩¹⁾, 菊地浩人¹⁾, 藤崎弘士¹⁾, 永井喜則²⁾, 輪湖 浩³⁾ (¹⁾ Department of Physics, Nippon Medical School, ²⁾ Center for Information Science, Kokushikan University, ³⁾ School of Social Sciences, Waseda University) : Molecular Orbital Analysis to Investigate the Reaction Mechanism of ATP Hydrolysis in Myosin

- Motor Domain. 日本生物物理学会 (第 48 回) (仙台), 2010. 9.
- 4) 藤崎弘士¹⁾, 志賀基之²⁾, 木寺詔紀³⁾ (1) Department of Physics, Nippon Medical School, 2) 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, 3) 横浜市大・生命ナノ・生体) : Path sampling for a model polymer using the Onsager-Machlup action. 日本生物物理学会 (第 48 回) (仙台), 2010. 9.
 - 5) 菊地浩人¹⁾, 藤崎弘士¹⁾, 古田忠臣²⁾, 岡本 研¹⁾, Leimkuler S³⁾, 西野武士⁴⁾ (1) 日本医科大学, 2) 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, 3) ボツダム大・生化学, 4) カリフォルニア大 (リバーサイド)・生化学) : Molecular dynamics study of the interaction between xanthine oxidoreductase and the inhibitor. 日本生物物理学会 (第 48 回) (仙台), 2010. 9.
 - 6) 松永康佑¹⁾, 藤崎弘士²⁾, 木寺詔紀³⁾ (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) Department of Physics, Nippon Medical School, 3) 横浜市大・生命ナノ・生体) : Capturing large-scale conformational transitions of adenylate kinase using the string method. 日本生物物理学会 (第 48 回) (仙台), 2010. 9.
 - 7) 志賀基之¹⁾, 藤崎弘士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) Department of Physics, Nippon Medical School) : 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算. 理論化学討論会(札幌), 2010. 5.
 - 8) 藤崎弘士¹⁾, 菊地浩人¹⁾, 戸田幹人²⁾, Straub EJ³⁾ (1) Department of Physics, Nippon Medical School, 2) 奈良女子大学・理学部・物理学科, 3) Department of Chemistry, Boston University) : Quantum dynamics study of energy transfer phenomena in porphyrin and its classical analysis. 日本物理学会秋季大会 (大阪), 2010. 9.
 - 9) 志賀基之¹⁾, 藤崎弘士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) Department of Physics, Nippon Medical School) : 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算. 分子科学討論会(大阪), 2010. 9.
 - 10) 藤崎弘士¹⁾, 志賀基之²⁾, 木寺詔紀³⁾ (1) Department of Physics, Nippon Medical School, 2) 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, 3) 横浜市大・生命ナノ・生体) : A multi-scale approach for path sampling. バイオスーパーコンピューティングシンポジウム (第 3 回) (神戸), 2011. 2.
 - 11) 松永康佑¹⁾, 藤崎弘士²⁾, 寺田 透¹⁾, 古田忠臣¹⁾, 木寺詔紀³⁾ (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) Department of Physics, Nippon Medical School, 3) 横浜市大・生命ナノ・生体) : スtring法によるタンパク質構造変化サンプリング. バイオスーパーコンピューティングシンポジウム (第 3 回) (神戸), 2011. 2.
 - 12) 志賀基之¹⁾, 藤崎弘士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) Department of Physics, Nippon Medical School) : 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算. 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発公開シンポジウム (第 5 回) (神戸), 2011. 2.
 - 13) 香川 浩¹⁾, 藤崎弘士¹⁾, 菊地浩人¹⁾, 志賀基之²⁾ (1) 日本医科大学, 2) 原子力開発機構) : ミオシン ATPase の分子軌道法による研究 : String法による加水分解反応経路の計算. 日本物理学会 (第 66 回) (新潟), 2011. 3.
 - 14) 藤崎弘士¹⁾, 菊地浩人¹⁾, 戸田幹人²⁾ (1) 日本医科大学, 2) 奈良女子大学) : 生体分子の量子エネルギー移動ダイナミクス. 日本物理学会 (第 66 回) (新潟), 2011. 3.
 - 15) 菊地浩人¹⁾, 藤崎弘士¹⁾, 古田忠臣²⁾, 岡本 研¹⁾, Leimkühler S³⁾, 西野武士⁴⁾ (1) 日本医科大学, 2) 理化学研究所, 3) Institute of Biochemistry and Molecular Biology, University of Potsdam, 4) Department of Biochemistry, University of California, Riverside) : キサンチン酸化還元酵素における阻害剤の作用の研究 : 「鍵と鍵穴」のドグマを超えて. 日本物理学会 (第 66 回) (新潟), 2011. 3.
 - 16) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士²⁾ (1) 九州大学, 2) 日本医科大学) : 多準位量子状態の最適制御と半古典極限. 日本物理学会 (第 66 回) (新潟), 2011. 3.