

2. 自然科学

[数学]

研究概要

Chiral anomaly の格子構成論には様々なアプローチがあるが、どの方法においても、chiral current の保存則の破れそのものではなく、mass correction term の massless limit を見ている可能性がある。この観点から Ginsparg-Wilson fermion に関する知見を厳密に精査している。(渡辺)作用素不等式と majorization および logarithmic majorization についての関係を調べた。また作用素のべきに関する不等式も考えている。(儀我)

研究業績

論文

(1) 原著：

- 1) 儀我真理子：理論の流れの中で考える。数学教育学会発表論文集 2012；(臨時増刊)：174-176.
- 2) 儀我真理子：ピタゴラスの定理の拡張と逆不等式。数学教育学会発表論文集 2011；(臨時増刊)：118-119.

(2) 総説：

- 1) Watanabe H：Applications of statistics to medical science, I. J Nippon Med Sch 2011；78 (5)：274-279.
- 2) Watanabe H：Applications of statistics to medical science, II. J Nippon Med Sch 2012；79 (1)：31-36.

学会発表

(1) 招待講演：

- 1) 儀我真理子：理論の流れの中で考える。数学教育学会春季年会（東京），2012. 3.

(2) 一般講演：

- 1) 儀我真理子：逆不等式とくに三角不等式について。数学教育の会（2011年夏の会）（東京），2011. 9.
- 2) 儀我真理子：ピタゴラスの定理の拡張と逆不等式。数学教育学会例会（長野），2011. 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. ミオシンのATP加水分解に伴う構造変化について、QM/MM法などを用いて計算を行っている。また、リン脂質リポソームの相転移についても計算を行っている。(香川) 2. キサンチン酸化還元酵素に関する論文を書き、出版した。今年度から、この酵素の理論計算的な研究に関して、代表者として科研費基盤Cの助成を受けている。また、藤崎講師と量子ダイナミクス共同研究を行っている。(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、また夏にはフンボルト財団からの支援によりフライブルグ大のGerhard Stock教授と共同研究を行った。現在は結果を論文にまとめているところである。キサンチン酸化還元酵素に関しても、菊地准教授と共同研究を行っており、科研費の分担者となっている。また、マルチスケールモデリングに関する科研費の支援を受けた、九州大学の高見准教授とも分担者として共同研究を行っており、癌のダイナミクスに関するモデル化も進めている。(藤崎)

研究業績

論文

(1) 原著：

- 1) Kikuchi H, Fujisaki H, Furuta T¹⁾, Okamoto K²⁾, Leimukuehler S³⁾, Nishino T⁴⁾ (¹⁾ Center for Biological Resources and Informatics, Tokyo Institute of Technology, ²⁾ Department of Biochemistry, Nippon Medical School, ³⁾ Department of Molecular Enzymology, Institute for Biochemistry and Biology, University of Potsdam, ⁴⁾ Department of Applied Biological Chemistry, Graduate School of Agricultural and Life Sciences, University of Tokyo) : Different inhibitory potency of febuxostat towards mammalian and bacterial xanthine oxidoreductases : insight from molecular dynamics. Sci. Rep. 2012 ; 2 : 331-1-331-8.

(2) 研究報告書：

- 1) 香川 浩：筋肉収縮の生物物理学的研究. 国士館大学情報科学センター紀要 2012 ; (33) : 43-47.
- 2) Nagai Y¹⁾, Yura K²⁾, Kagawa H, Wako H³⁾ (¹⁾ Center for Information Science, Kokushikan University, ²⁾ Computational Biology, Graduate School of Humanities and Sciences, Ochanomizu University, ³⁾ School of Social Sciences, Waseda University) : Discretized Curvature Analysis for Ribose and Adenine Rings of ATP-Analogs Bound to Myosin. 国士館大学情報科学センター紀要 2012 ; (33) : 55-60.

著書

- 1) Fujisaki H, Zhang Y¹⁾, Straub EJ²⁾ (¹⁾ Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Notre Dame, ²⁾ Department of Chemistry, Boston University) : [分担] Non-Markovian theory of vibrational energy relaxation and its application to biomolecular systems. Advances in Chemical Physics (A.R. Dinner, S.A. Rice), 2011 ; pp1-33, John Wiley & Sons.
- 2) Fuchigami S¹⁾, Fujisaki H, Matsunaga Y²⁾, Kidera A¹⁾ (¹⁾ Department of Supramolecular biology, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University, ²⁾ Molecular Scale Team, Integrated Simulation of Living Matter Group, Computational Science Research Program, RIKEN) : [分担] Protein functional motions : Basic concepts and computational methodologies. Advances in Chemical Physics (A.R. Dinner, S.A. Rice), 2011 ; pp35-82, John Wiley & Sons.

学会発表

(1) 招待講演：

- 1) 藤崎弘士：生体分子におけるパスサーチ・パスサンプリング. CMSI 若手技術交流会（第3回）（東京大学先端科学技術研究センター），2011. 11.

(2) シンポジウム：

- 1) 藤崎弘士：生体分子におけるパスサーチ・パスサンプリング（化学反応や生体高分子の構造変化における状態変化の起源を探る）. 日本物理学会第67回年次大会（関西学院大学），2012. 3.
- 2) 藤崎弘士：主旨説明（ハイパフォーマンスコンピューティングを使った生体分子のシミュレーション：その現状と課題）. 日本物理学会2011年度秋季大会（富山大学），2011. 9.

(3) セミナー：

- 1) 藤崎弘士：タンパク質科学の未来を語る：実験・理論研究者の対話. 蛋白質研究所セミナー（大阪大学），2011. 11.
- 2) 藤崎弘士：Path sampling based on path integral : Quantum string method and Onsager-Machlup action functional approach. 高次元のサンプリングとデータ解析から見たシミュレーション科学（統計数理研究所），2012. 3.

- 3) Fujisaki H : Quantum dynamics in complex systems : Biomolecules, random matrix, and quantum chaotic systems. Quantum Efficiency Seminar (Freiburg Institute for Advanced Studies), 2011. 7.
- (4) 一般講演 :
- 1) Ogihara T¹⁾, Gao Q²⁾, Shibata A³⁾, Kagawa H (¹⁾ Department of General Science, Azabu University, ²⁾ Mitsubishi Chemical Group Science and Technology Reserch Center, Inc., ³⁾ Department of Clinical Laboratory Science, Nitobe-Bunka College) : A Study of the Phase Transition Temperature and Bilayer Structure Change of Phospholipid by MD Method. 9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (Santiago de Compostela, Spain), 2011. 7.
 - 2) 香川 浩, 藤崎弘士, 菊地浩人, 志賀基之¹⁾ (¹⁾ 原子力研究開発機構) : ミオシン ATPase における加水分解の反応経路 : QM/MM 法による計算に向けて. 日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 3) Kikuchi H, Fujisaki H, Furuta T¹⁾, Okamoto K²⁾, Leimkuhler S³⁾, Nishino T⁴⁾ (¹⁾ Center for Biological Resources and Informatics, Tokyo Institute of Technology, ²⁾ Department of Biochemistry, Nippon Medical School, ³⁾ Department of Molecular Enzymology, Institute for Biochemistry and Biology, University of Potsdam, ⁴⁾ Department of Applied Biological Chemistry, Graduate School of Agricultural and Life Sciences, University of Tokyo) : Structure-based inhibitor mechanism of febuxostat for xanthine oxidoreductase : molecular dynamics study. 9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (Santiago de Compostela, Spain), 2011. 7.
 - 4) 藤崎弘士, 菊地浩人, 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾ (¹⁾ 奈良女子大学 理学部 物理学科, ²⁾ 九州大学 情報基盤研究開発センター) : 分子階層モデルを使った生体分子の量子ダイナミクス. 日本物理学会秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 5) 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾, 福水健次³⁾, 菊地浩人, 藤崎弘士 (¹⁾ 奈良女子大学理学部物理学科, ²⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター, ³⁾ 統計数理研究所) : 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析. 日本物理学会 2011 年度秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 6) 高見利也¹⁾, 下川倫子²⁾, 藤崎弘士, 小林泰三¹⁾ (¹⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター, ²⁾ 千葉大学先進科学センター) : 遅いダイナミクスにより生成される表面パターン. 日本物理学会 2011 年度秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 7) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士 (¹⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター) : カオス系の最適制御における量子古典対応. 日本物理学会 2011 年度秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 8) 菊地浩人, 藤崎弘士, 古田忠臣¹⁾, 岡本 研²⁾, 西野武士³⁾ (¹⁾ 東京工業大学大学院生命理工学研究科生体分子機能工学専攻, ²⁾ 日本医科大学 生化学・分子生物学講座生化学第一教室, ³⁾ 東京大学大学院農学生命科学科応用生命化学専攻) : キサンチン酸化還元酵素に対するフェブキシostat の阻害作用. 日本物理学会 2011 年度秋季大会 (富山大学), 2011. 9.
 - 9) 松永康佑¹⁾, 藤崎弘士, 寺田 透²⁾, 木寺詔紀³⁾ (¹⁾ 理化学研究所, ²⁾ 東京大学大学院農学生命科学研究科, ³⁾ 横浜国立大学) : タンパク質構造変化における最少自由エネルギー経路の解析. 分子シミュレーション討論会 (第 25 回) (東京工業大学 大岡山キャンパス), 2011. 12.
 - 10) Fujisaki H, Shiga M¹⁾, Kidera A²⁾ (¹⁾ Japan Atomic Energy Agency, ²⁾ Department of Supramolecular Biology, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University) : A multiscale approach for path sampling : Application to peptides. 56th Annual Meeting of Biophysical Society (San Diego, USA), 2012. 2.
 - 11) 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾, 福水健次³⁾, 菊地浩人, 藤崎弘士 (¹⁾ 奈良女子大学理学部物理学科, ²⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター, ³⁾ 統計数理研究所) : 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析 2. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.
 - 12) 富士香奈¹⁾, 関嶋政和²⁾, 藤崎弘士, 戸田幹人¹⁾ (¹⁾ 奈良女子大学理学部物理学科, ²⁾ 東京工業大学学術国際情

報センター)：生体分子の分子動力学に対する時系列解析：集団運動の揺らぎと構造変化の関係を探る. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.

13) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士⁽¹⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター)：カオス系の最適制御問題における量子古典対応 2. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.

14) 下川倫子¹⁾, 高見利也²⁾, 藤崎弘士, 小林泰三²⁾ (¹⁾ 千葉大学先進科学センター, ²⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター)：粘性流体中を落下する滴の分離と変形. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.

15) 藤崎弘士, 菊地浩人, 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾ (¹⁾ 奈良女子大学理学部物理学科, ²⁾ 九州大学情報基盤研究開発センター)：分子階層モデルを使った量子ダイナミクス 2. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.

16) 志賀基之¹⁾, 藤崎弘士⁽¹⁾ 原子力研究開発機構)：量子統計に従ったプロトン移動反応の経路探索. 日本物理学会第 67 回年次大会 (関西学院大学), 2012. 3.

[化学]

研究概要

中村：(1) フラーレン誘導体の合成及び、その HIV 逆転写酵素阻害、アポトーシス誘導などの生物活性に関する研究。(2) 薬物代謝酵素シトクロム P450 によるフェノール類の代謝反応機構の解明及び、新規代謝物の探索。(3) 天然物を規範とした抗酸化物質のデザイン・合成及び、抗酸化作用との構造活性相関。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) カンファーなどの天然物ケトンを用いた不斉合成配位子の合成。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：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) 弱酸性陽イオン交換体に対するアルカリ土類金属元素および希土類元素の吸着挙動。(2) 弱酸性陽イオン交換体を用いるジルコニウム (IV)、ハフニウム (IV)、および他の金属の三成分分離(3) 陰イオン交換樹脂を用いる貴金属元素の回収と定量。

研究業績

論文

(1) 総説：

1) 中村成夫：フルラーレンの抗ウイルス薬としての可能性. BIO INDUSTRY 2012 ; 29 (3) : 33-38.

著書

1) 中村成夫：〔分担〕第 9 章 酸と塩基. 基礎有機化学 (小林進, 三巻祥浩 編), 2012 ; pp77-82, 培風館.

学会発表

(1) 特別講演：

1) 中村成夫：創薬を指向したフルラーレン誘導体の構造展開. 日本医科大学医学会総会 (第 79 回) (東京), 2011. 9.

(2) 一般講演：

1) Nakamura S, Takeuchi Y¹⁾, Shinohara M¹⁾, Takahashi K¹⁾, Mashino T¹⁾ (¹⁾ Dept Pharm Sci, Keio Univ) : Inhibition of HIV-Reverse Transcriptase by Amino Acid-type Fullerene Derivatives and Effect of Substituent