

2. 自然科学

[数学]

研究概要

波動方程式やシュレディンガー方程式の解の挙動、散乱理論に興味がある。最近は特に対応する定常問題の空間2次元での一様リゾルベント評価、並びに、その応用として、摩擦項を伴う波動方程式に対する極限振幅の原理、シュレディンガー方程式に対する平滑化評価を考察している(中澤)。作用素不等式の問題を作用素単調性、作用素凸性との関係からスペクトル分解などを利用して考察している。また確率統計の本を執筆している(儀我)。

研究業績

学会発表

(1) 招待講演:

- 1) 中澤秀夫: Uniform resolvent estimates for stationary Schrödinger equations in a two dimensional exterior domain and their applications. The 5th Nagoya Workshop on Differential Equations (名古屋大学), 2013. 3.

(2) 一般講演:

- 1) 中澤秀夫: Uniform resolvent estimates for Helmholtz equation in an exterior domain and their application to scattering problems. The 9th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and applications (Orlando, Florida, USA), 2012. 7.
- 2) 中澤秀夫: On the wave equation with dissipations. Japan-Taiwan Joint Conference (台湾国立大学), 2012. 12.
- 3) 中澤秀夫: 2次元外部領域におけるヘルムホルツ方程式のリゾルベント評価とその応用. 広島大学数理科学セミナー(広島大学), 2012. 6.

[物理学]

研究概要

物理学教室では、菊地浩人(准教授)と藤崎弘士(准教授)の二人が、化学物理学分野および生物物理学分野において、理論あるいは計算機実験(シミュレーション)を用いて研究を行っている。具体的な今年度の研究概要は次の通りである。1. 昨年度に引き続き、キサランチン酸化還元酵素において、レセプター・リガンド相互作用に関して、より詳細に分子動力学的計算を行いながら検討している。具体的には、リガンドが結合するレセプターのキャビティー入り口付近のアミノ酸残基に着目し、計算機上でポイントミュートーションを行い、それらのモデルに対する動力学の結果の違いに関してデータを集めている。2. 昨年度に引き続き、分子の量子ダイナミクスに関する理論研究を行っており、分子の階層モデルに関する基礎理論を構築している。具体的には、Rubtsovらによって実験的に調べられている分子のモード間エネルギー移動を調べており、非線形結合の適正な計算、階層モデルの更なる改良によって、実験結果をよく説明するような結果を得ることができた。3. マルチスケールな考えに基づくパスサンプリングの新手法を開発し、モデルポリマーの構造変化(アンルーピングダイナミクス)に応用した。現在はより現実的なペプチドの構造変化の計算を行っている。4. ガンのダイナミクスを反応拡散方程式で記述し、計算するための準備を進めた。なお、1, 2に関しては科研費基盤Cの助成を受けている。

研究業績

論文

(1) 原著：

- 1) Matsunaga Y²⁾, Fujisaki H^{1, 2)}, Terada T²⁾, Furuta T²⁾, Moritsugu K²⁾, Kidera A^{2, 3)} (1) Department of Physics, Nippon Medical School, 2) Molecular Scale Team, Integrated Simulation of Living Matter Group, RIKEN, 3) Department of Supramolecular Biology, Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University) : Minimum Free Energy Path of Ligand-Induced Transition in Adenylate Kinase. PLoS Comput Biol 2012 ; 8 : e1002555-1-e1002555-12.
- 2) Shiga M¹⁾, Fujisaki H^{2, 3)} (1) Center for Computational Science and E-Systems, Japan Atomic Energy Agency (JAEA), 2) Department of Physics, Nippon Medical School, 3) Molecular Scale Team, Integrated Simulation of Living Matter Group, RIKEN) : A quantum generalization of intrinsic reaction coordinate using path integral centroid coordinates. J Chem Phys 2012 ; 136 : 184103-1-184103-11.

(2) 研究報告書：

- 1) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士²⁾ (1) 九州大学・情報基盤研究開発センター, 2) 日本医科大学・物理学教室) : 複雑量子系の最適制御理論. 日本医科大学基礎科学紀要 2012 ; 41 : 27-56.
- 2) 藤崎弘士^{1, 2)}, 古田忠臣³⁾, 岡本 研⁴⁾, 菊地浩人¹⁾ (1) 日本医科大学・物理学教室, 2) 理化学研究所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) 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, 4) 日本医科大学・分子生物学) : 理論生物物理と生化学を組み合わせた薬効研究：キサントシン酸化還元酵素と阻害剤フェブキソスタットの結合機序. 日医大医学会誌 2012 ; 8 (3) : 222-227.

学会発表

(1) 一般講演：

- 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, 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) : Path Search and Path Sampling Algorithms for Complex Molecular Systems. JST International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (Nagoya University ES hall, Nagoya, Japan), 2012. 5.
- 2) Fujisaki H¹⁾ (1) Department of Physics, Nippon Medical School) : Theoretical investigation of vibrational energy transfer using the tier model with ab initio potential energy surfaces. Gordon Research Conference on vibrational spectroscopy (Biddeford, Maine (USA)), 2012. 8.
- 3) Kikuchi H¹⁾, Fujisaki H^{1, 2)}, Furuta T³⁾, Okamoto K¹⁾, Nishino T⁴⁾ (1) 日本医科大学, 2) 理化学研究所, 3) 東京工業大学, 4) 東京大学) : Molecular dynamics and free energy analysis of xanthine oxidoreductase-ligand interactions. TACC 2012 Theory and Applications of Computational Chemistry (University of Pavia, Italy), 2012. 9.
- 4) 高見利也¹⁾, 下川倫子²⁾, 藤崎弘士³⁾, 小林泰三¹⁾ (1) 九州大学, 2) 千葉大学, 3) 日本医科大学) : ミルク上のコーヒーパターン形成の粒子シミュレーション. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
- 5) 高見利也¹⁾, 藤崎弘士²⁾ (1) 九州大学, 2) 日本医科大学) : カオス力学系の最適制御軌道. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
- 6) 藤崎弘士¹⁾, 菊地浩人¹⁾, 戸田幹人²⁾, 高見利也³⁾ (1) 日本医科大学, 2) 九州大学, 3) 奈良女子大学) : 分子階層モデルを使った量子ダイナミクス 3. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
- 7) 岸田直子¹⁾, 藤崎弘士²⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 日本医科大学) : シナプス結合に関与する PDZ ドメ

- インの分子動力学データに対する時系列解析. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
- 8) 富士香奈¹⁾, 関嶋政和²⁾, 藤崎弘士³⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 東京工業大学, 3) 日本医科大学): 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 II. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
 - 9) 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾, 福水健次³⁾, 菊地浩人⁴⁾, 藤崎弘士⁴⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 九州大学, 3) 統計数理研究所, 4) 日本医科大学): 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析 3. 日本物理学会秋季大会 (横浜国立大学), 2012. 9.
 - 10) 岸田直子¹⁾, 藤崎弘士²⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 日本医科大学): The time series analysis of molecular dynamics data about PDZ domain in synapse. 日本生物物理学会年会 (名古屋大学), 2012. 9.
 - 11) 富士香奈¹⁾, 関嶋政和²⁾, 藤崎弘士³⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 東京工業大学, 3) 日本医科大学): Time-series analysis of molecular dynamics: Conformational change and dynamics of collective behavior. 日本生物物理学会年会 (名古屋大学), 2012. 9.
 - 12) 戸田幹人¹⁾, 高見利也²⁾, 福水健次³⁾, 菊地浩人⁴⁾, 藤崎弘士⁴⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 九州大学, 3) 統計数理研究所, 4) 日本医科大学): 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析 4. 日本物理学会年会 (広島大学), 2013. 3.
 - 13) 岸田直子¹⁾, 藤崎弘士²⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 日本医科大学): シグナル伝達に関与する PDZ ドメインの分子動力学データに対する時系列解析 2. 日本物理学会年会 (広島大学), 2013. 3.
 - 14) 高見利也¹⁾, 下川倫子²⁾, 藤崎弘士³⁾, 小林泰三¹⁾ (1) 九州大学, 2) 千葉大学, 3) 日本医科大学): コーヒーフラクタルの DLA 的モデルによる再現と解析. 日本物理学会年会 (広島大学), 2013. 3.
 - 15) 富士香奈¹⁾, 関嶋政和²⁾, 藤崎弘士³⁾, 戸田幹人¹⁾ (1) 奈良女子大学, 2) 東京工業大学, 3) 日本医科大学): 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 III. 日本物理学会年会 (広島大学), 2013. 3.
 - 16) 藤崎弘士^{1, 2)}, 松永康佑²⁾, 木寺詔紀^{2, 3)} (1) 日本医科大学, 2) 理化学研究所, 3) 横浜市立大学): Onsager-Machlup 作用を用いたペプチドのパスサンプリング. 日本物理学会年会 (広島大学), 2013. 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と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) イオン交換樹脂を用いる貴金属元素の回収と定量.