

## 2014年度の業績（物理学教室）

今年度の研究概要は以下の通りである。

1. キサンチン酸化還元酵素(XOR)において、レセプターリガンド相互作用に関する研究を継続して行っている。XOR に対する **structure-based** のリガンドである **BOF** は、既に新薬として認可されている **Febuxostat** と同様、哺乳類の XOR には強く阻害がかかるが、細菌由来の XOR には阻害がほとんどかからない。BOF が細菌由来の XOR の結合キャビティーに入ったときに、XOR の一部分のペプチドターンが開閉するゲートのような動きをすることを分子動力学計算から見出し、現在この運動と阻害作用との関連性などを調べている。(菊地・藤崎)
2. 奈良女子大の戸田幹人准教授と、生体分子におけるエネルギー移動の解析を始め、時系列解析の観点から解析を進めている。(藤崎)
3. 大きな分子に関する振動量子ダイナミクスを効率的に可能とする階層(tier)モデルの開発を続けている。共同研究者 **Gerhard Stock** 教授との議論のために8月末から2週間ほどドイツに滞在した。その結果を紀要論文や投稿論文としてまとめた。(藤崎・菊地)
4. いくつかの国際会議でレアイベントに関する研究成果を発表し、またいくつかのシンポジウムを共同企画した。これと関連して、現在はレアイベントにおけるキネティクスを計算する手法を開発している。(藤崎)

なお、1に関しては科研費基盤 C、2に関しては萌芽研究の助成を受けている。

### 翻訳

1. Daniel M. Zuckerman 著、藤崎弘士・藤崎百合訳、生体分子の統計力学入門、共立出版 (2014).

### 紀要原稿など

2. 藤崎弘士、分子階層モデルを用いた量子ダイナミクスの計算手法の開発、日本医科大学基礎科学紀要 43, 19-61 (2014). 2014年9月
3. 藤崎弘士、パスサンプリングとベイズ推定、統計数理 62, (2014) (11 pages). 2014年12月
4. 藤崎弘士、分子系における遷移・反応レートの計算法について I、分子シミュレーション学会誌アンサンブル (2015) (7 pages). 2015年1月

## 学会発表

### 招待講演 (Invited talk)

5. 藤崎弘士、生体分子のパスサンプリング、武田薬品計算化学セミナー (藤沢) 2014 年 6 月 12 日
6. 藤崎弘士、生体分子における反応経路とキネティックスの計算手法、化学反応経路探索のニューフロンティア 2014 (広島大) 2014 年 9 月 20 日
7. Hiroshi Fujisaki, Path search and sampling methods for biomolecular systems, International symposium on extended molecular dynamics and enhanced sampling: Nose dynamics 30 years (NOSE30), Keio Univ. 11/11, 2014.
8. Hiroshi Fujisaki, Rare event sampling problems for biomolecules, Research Center for the Mathematics on Chromatin Live Dynamics, Hiroshima Univ. 11/28, 2014.
9. Hiroshi Fujisaki, Rare event sampling for conformational change and ligand binding for biomolecules, The 9<sup>th</sup> International Conference on Computational Physics, National University of Singapore, Jan. 7-11, 2015.
10. 藤崎弘士、生体分子における反応経路とキネティックスの計算手法、研究会「柔らかな系を扱う自由エネルギー計算」(東北大) 2015 年 2 月 16-17 日
11. Hiroshi Fujisaki, Extracting free energy profile and diffusion coefficients using the Onsager-Machlup action principle, Rare Event Sampling and Related Topics II, Institute for Mathematical Statistics (Tachikawa), 3/27-28, 2015.

### 一般講演

12. Hiroto Kikuchi, Hiroshi Fujisaki, Tadaomi Furuta, Ken Okamoto, Takeshi Nishino, The loop opening motion of the bacterial XOR with the inhibitor BOF: molecular dynamics study, WATOC 2014, Santiago, Chile, 10/5-10, 2014.
13. Hiroshi Fujisaki, Norifumi Yamamoto, Kana Fuji, Mikito Toda, Dynamical aspects of ligand binding: A case study for PDZ domain protein, 52<sup>nd</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Sapporo Convention Center, 9/25-27, 2014.
14. 藤崎弘士、分子階層モデルを用いた量子ダイナミクスの計算、瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム、加計学園国際学術交流センター (倉敷)、2014 年 12 月 5-6 日
15. 藤崎弘士、古田忠臣、戸田幹人、非平衡分子動力学を用いた生体分子内のエネルギー移動の解析、日本物理学会春季大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21-24 日
16. 櫛田菜実、富士香奈、藤崎弘士、戸田幹人、大自由度力学系における振動エネルギー移動の解析、日本物理学会春季大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21-24 日