

## 2015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。阻害剤 BOF がバクテリア由来の XOR のキャビティーに入ったときに、キャビティー入り口付近の一つのペプチドターンが、酵素の外側に開いて、BOF が外れやすいような動きをすることがわかったが、分子動力学計算を更に行うことによって、哺乳類の同じ箇所が同じような動きをしないことがわかった。XOR と BOF の相互作用に関する静的、動的な構造に関する論文としてまとめている他、生体の様々な分子が XOR キャビティー内に入出入りすることを制御している部分ではないかという仮説に基づき、本来の基質が XOR キャビティー内に入ったときの状況を計算している。(菊地、藤崎)
2. 溶媒に存在する励起分子のスペクトル形状関数の定式化を行い始めた。以前、溶媒を単なる熱浴と近似したスペクトル形状関数を定式化したが、溶媒による熱浴以外の効果に関しても、スペクトル形状関数に与える影響を明らかにするように定式化を行っている。(菊地)
3. 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と構造変化の関連に関して、時系列解析の観点から解析を進めている。(藤崎)
4. 去年に引き続き、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 Luca Maragliano 氏、光武亜代理氏(慶応大)と共同で開発し、論文にまとめている。(藤崎)

なお、1 に関しては科研費基盤 C、3 に関しては萌芽研究の助成を受けている。

論文（査読有り）

1. [Hiroshi Fujisaki](#), Kei Moritsugu, Yasuhiro Matsunaga, Tetsuya Morishita, Luca Maragliano, Extended phase-space methods for enhanced sampling in molecular simulations: a review, *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 3:125, doi: 10.3389/fbioe.2015.00125 (2015). 2015年9月

## 紀要原稿など

2. 藤崎弘土、分子系における遷移・反応レートの計算法について II、分子シミュレーション学会誌アンサンブル 17 (2015) 175-180. 2015 年 7 月
3. 藤崎弘土、分子系における遷移・反応レートの計算法について III、分子シミュレーション学会誌アンサンブル 18 (2016) 39-44. 2016 年 1 月

## 学会発表

### 招待講演 (Invited talk)

4. 藤崎弘土、生体分子における反応経路とキネティクスの計算手法、矢上統計物理学セミナー (慶応大学) 2015 年 5 月 22 日
5. 藤崎弘土、生体分子に対するレアイベントサンプリングの理論的アプローチ、第 15 回日本蛋白質科学会年会、あわぎんホール (徳島市) 2015 年 6 月 24-26 日
6. 藤崎弘土、複雑な分子はどんな道筋を通過して、どれくらい速く反応するのか? - 反応経路計算の理論化学的アプローチについて -、津田沼分子科学フォーラム (千葉工業大学) 2015 年 7 月 11 日
7. 藤崎弘土、生体分子におけるパスサーチ・パスサンプリング、ランダム力学系とその応用 2015 (京都大学数理解析研究所) 2015 年 9 月 27-30 日

### 一般講演

8. Hiroto Kikuchi, Hiroshi Fujisaki, Tadaomi Furuta, Ken Okamoto, Takeshi Nishino, On the motion of a loop located in the entrance to the ligand-binding pocket of bacterial XOR with the inhibitor BOF, 53rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kanazawa Univ. (Kanazawa), 9/13-15, 2015.
9. Hiroshi Fujisaki, Ayori Mitsutake, Investigating kinetics of conformational change using molecular dynamics and milestoning, 53rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kanazawa Univ. (Kanazawa), 9/13-15, 2015.
10. 藤崎弘土、生体分子におけるキネティクスの計算手法、研究会「非線形現象の捉え方」、FIT セミナーハウス (大分県由布院) 10/9-12, 2015.
11. Hiroshi Fujisaki, Ayori Mitsutake, Investigating kinetics of conformational change using molecular dynamics and milestoning, Biophysical Society 60th Annual Meeting, Los Angeles Convention Center (Los Angeles), 2/27-3/2, 2016.

12. 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、研究交流会「理論分子科学・分子非線形科学のこれまでとこれから」、東京大学（駒場キャンパス）3/5-6, 2016.
13. 藤崎弘士、光武亜代理、生体分子における構造変化遷移レートのマイルストーン法を用いた計算、日本物理学会第 71 回年会、東北学院大学（泉キャンパス）、3/19-22, 2016.

#### 研究会主催

藤崎弘士、レア・イベントとしてのタンパク質構造ダイナミクスの理論と実験、第 15 回日本蛋白質科学会年会、あわぎんホール（徳島市）6/24-26, 2015. 楯真一教授（広島大）との共同主催、シンガポールから Weiqing Ren 氏を招聘

藤崎弘士、生体分子におけるレアイベントの探求、第 53 回日本生物物理学会年会、金沢大学角間キャンパス（金沢）、9/13-15, 2015. 米澤康滋教授（近畿大）と共同主催

藤崎弘士、Rare Event Sampling and Related Topics III, The Institute of Statistical Mathematics, (Tachikawa, Tokyo) 11/12-13, 2015. 伊庭幸人教授（統計数理研究所）との共同主催、イタリアから Luca Maragliano 氏を招聘

#### 社会活動など

統計数理研究所 情報システム研究機構 客員准教授(2015年4月～) 藤崎弘士

日本物理学会 学会誌編集委員(2016年4月～) 藤崎弘士

日本生物物理学会 分野別専門委員(2016年4月～) 藤崎弘士