

## 2020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. 横浜市大の森次圭准教授、埼玉大の松永康佑准教授とともに、アデニル酸キナーゼの動的な遷移状態やリガンド結合のダイナミクスについて、重み付きアンサンブル法を用いて調べている。また PIN1 酵素の異性化反応を重み付きアンサンブル法で計算する論文を出版した（藤崎）。
2. 明治大の光武亜代理准教授、大分大の末谷大道教授とともに、タンパク質の長時間ダイナミクスに対して、多様体学習の一つである拡散マップ法を適用している。G タンパク質の時系列に適用し、短時間で計算した場合の拡散マップの意義などについて調べている（藤崎・菊地）。
3. 本学形成外科の小川令教授のグループが進めているメカノセラピーを理論・計算面で支えるために、専修大の小田切健太准教授とともに細胞ダイナミクスのモデル化を行い、その論文化を進めている。また実験データを用いてデータ同化の計算を行うための計算機のセットアップを行っている。計算結果のデモンストレーション用に python コードも作成した（藤崎）。
4. 本学の早坂明哲講師とともに、医学教育における PBL のデータを google document で読み込み、Wordcloud にして、その特徴量を抜き出すためのパイプライン作りを行っている（藤崎）。
5. 分子内のエネルギー移動に関して、ポルフィリンの階層モデルを使った量子計算を行っているが、階層間の結合がフルに取り入れられていなかったことが分かったので、それを修正した計算を行なっている（藤崎）。
6. 都立大の好村滋行教授とともに、「生物物理・ソフトマター物理と医学の接点を探る」という医学と物理の接点を考えるためのシンポジウムを企画しており、2021年11月の生物物理学会で開催する予定である（藤崎）。
7. シアノバクテリアや紅藻の光吸収アンテナ系には、超分子会合体のフィコビリソーム (PBS) が存在している。PBS は階層構造を構成していて、下位の階層で生まれる分子レベルの性質を、洗練された生体の機能として利用できるように、より上位の階層構造が組み立てられている。階層構造の中で、フィコシアニン 3 量体の円盤形をした階層構造とその円盤が head-to-head で結合した 1 つ上位の 6 量体の階層構造がある。この 6 量体の階層構造が機能上どのような意味を持つのか、フィコシアニン発色団の光吸収特性の計算とエネルギー移動の観点から明らかにした。（菊地）
8. キサンチン酸化還元酵素 (XOR) と阻害剤 BOF-4272 に関する動力的な研究成果に関する論文を現在準備している。（菊地・藤崎）

なお、1,2,3,4 に関しては科研費基盤 C、3 に関しては AMED-CREST の助成を受けている。

論文 (査読有り)

1. Hiroto Kikuchi, Functional roles of the hexamer structure of C - phycoyanin revealed by calculation of absorption wavelength, FEBS Open Bio. (2020) doi:10.1002/2211-5463.13038.
2. Hiroshi Fujisaki, Yasuhiro Matsunaga, Kei Moritsugu, Weighted ensemble simulations for conformational changes of proteins, AIP Conference Proceedings 2343, 020016 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0047730>
3. Kenta Odagiri, Hiroshi Fujisaki, Mathematical Model for Wound Healing caused by Exogeneous Mechanical Forces, AIP Conference Proceedings 2343, 020017 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0048360>
4. Kei Moritsugu, Norifumi Yamamoto, Yasushige Yonezawa, Shin-ichi Tate, Hiroshi Fujisaki, Path Ensembles for Pin1-Catalyzed Cis-trans Isomerization of a Substrate Calculated by Weighted Ensemble Simulations, J. Chem. Theory Comput. (2021) XXXX, [doi.org/10.1021/acs.jctc.0c01280](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c01280).
5. Kenta Odagiri, Hiroshi Fujisaki, Mathematical model for wound healing caused by exogeneous mechanical forces, in preparation.
6. Hiroshi Fujisaki, Multiscale aspects of molecular motions: From molecular vibrations, conformational changes of biomolecules to cellular dynamics, in preparation.

紀要原稿など

1. 松永康佑, 森次圭, 藤崎弘士, タンパク質の構造変化をどのように記述するか --- 生体分子におけるパスサンプリング手法の発展, 日本物理学会誌, 改訂中

学会発表

招待講演 (Invited talk)

1. Hiroshi Fujisaki, Weighted ensemble simulations for conformational changes of proteins, 16th Int. Conf. Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2020), Crete, Greece (Virtual Conference), 29 April-3 May 2020.
2. 藤崎弘士, Weighted ensemble simulations for conformational changes of proteins, 統計数理研究所セミナー, 2020年12月7日
3. 藤崎弘士, 生体分子ダイナミクス入門, 大学院集中講義 (物理化学特別講義 I) (東京都立大学) 2020年12月14-15日.

4. 藤崎弘土, 生体分子のパスサンプリング, 第 306 回化学コロキウム (東京都立大学), 2020 年 12 月 15 日.
5. 藤崎弘土, 量子カオスからタンパク質ダイナミクスへ, 複雑系数理: 物理・化学・生物・情報とカオス (Virtual Conference), 2021 年 3 月 27-28 日.

#### 一般講演

1. 藤崎弘土, 森次圭, 松永康佑, 構造変化とリガンド結合の競合ダイナミクス: 重み付きアンサンブル法を用いた計算, 日本物理学会 2020 年秋季大会 9 月 10-13 日
2. 小田切健太, 藤崎弘土, 細胞に加わる力を考慮した血管ネットワーク形成のモデル化, 日本物理学会 2020 年秋季大会 9 月 10-13 日
3. Hiroshi Fujisaki, Hiroto Kikuchi, Hiromichi Suetani, Ayori Mitsutake, Diffusion map analysis of long-time protein dynamics, 第 58 回日本生物物理学会年会 2020 年 9 月 16-18 日 (Virtual Conference).
4. Kei Moritsugu, Norifumi Yamamoto, Yasushige Yonezawa, Shin-ichi Tate, Hiroshi Fujisaki, Obtaining path ensemble of Pin1-catalyzed cis-trans isomerization by weighted ensemble simulation, 第 58 回日本生物物理学会年会 2020 年 9 月 16-18 日 (Virtual Conference).
5. H. Kikuchi, Functional meaning of hexamer structure of C-phycoerythrin revealed by calculation of absorption wavelength, 第 58 回日本生物物理学会年会 2020 年 9 月 16-18 日 (Virtual Conference).

#### 研究会主催

藤崎弘土, 好村滋行氏 (東京都立大学), 生物物理・ソフトマター物理と医学の接点を探る, 第 59 回日本生物物理学会のシンポジウム企画.

#### 科研費受領状況

革新的先端研究開発支援事業「メカノバイオロジー機構の解明による革新的医療機器及び医療技術の創出」周期的圧刺激によって制御される血管新生のシグナル伝達機構の解明 — 非接触超音波を用いた創傷治療法の開発を目指して —, 2017~2021 年度 (研究代表者: 小川令、研究分担者: 藤崎弘土、他 3 名)

科学研究費補助金 基盤研究(C) 特設分野「遷移状態制御」

酵素反応のボトルネックを探る：反応経路サンプリングによる計算 と実験による検証（課題番号 17KT0101）、2017~2020 年度（研究代表者：藤崎弘士、研究分担者：楯真一、山本典史、森次圭）

科学研究費補助金 基盤研究(C)

機械学習で議事録を分析：PBL チュートリアルチューター支援システムの開発（課題番号 19K10545）, 2019-2022 年度（研究代表者：早坂明哲、研究分担者：藤崎弘士、他 4 人）

科学研究費補助金 基盤研究(C)

リアルタイムイメージングから構築するがん細胞動態の高精度予測モデル（課題番号 19K12207）, 2019-2022 年度（研究代表者：小田切健太、研究分担者：藤崎弘士、他 1 人）

社会活動など

藤崎弘士, PLoS ONE Editorial Board (2018 年 9 月~)

藤崎弘士, 富樫祐一氏（広島大）と雑誌 Life (MDPI) における特別号 “Multiscale simulation methods for living systems: Applications to biomolecules and cells”の企画

藤崎弘士, 日本物理学会 2020 年秋季大会 座長

2020 年度の嘱託

柳沢直也氏（東京都立大学）

石塚典義氏（国立天文台）

三藤紋子氏（お茶の水女子大）

小林宇海氏（国立天文台）