

誌 上 発 表 Publications

[雑誌]

(原著論文) *印は査読制度がある論文誌

Re S., Jung J., Tenno S., and Sugita Y.: “A two-dimensional energy surface of the phosphoryl transfer reaction catalyzed by phosphoserine phosphatase”, *Chem. Phys. Lett.* **480**, 284–288 (2009). *

Miyashita N., Straub J. E., Thirumalai D., and Sugita Y.: “Transmembrane Structures of Amyloid Precursor Protein Dimer Predicted by Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations”, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, No. 10, pp. 3438–3439 (2009). *

Pisliakov A., Cao J., Kamerlin S. C., and Warshel A.: “Enzyme millisecond conformational dynamics do not catalyze the chemical step”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106**, No. 41, pp. 17359–17364 (2009). *

Yoshidome T., Oda K., Harano Y., Roth R., Sugita Y., Ikeguchi M., and Kinoshita M.: “Free-energy function based on an all-atom model for proteins”, *Proteins: Struct. Funct. Bioinf.* **77**, 950–961 (2009). *

Mori T., Ishitani R., Tsukazaki T., Nureki O., and Sugita Y.: “Molecular Mechanisms Underlying the Early Stage of Protein Translocation through the Sec Translocon”, *Biochemistry* **49**, 945–950 (2010). *

Ramesh S. G., Re S., Boisson J., and Hynes J. T.: “Vibrational symmetry breaking of NO_3^- in aqueous solution: NO asymmetric stretch frequency distribution and mean splitting”, *J. Phys. Chem. A* **114**, No. 3, pp. 1255–1269 (2010). *

(総説)

榮慶大, 依田隆夫, 杉田有治, 岡本祐幸: “タンパク質系のポテンシャル関数の比較と改良”, *分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」* **11**, No. 3, pp. 8–12 (2009).

(その他)

宮下尚之, 杉田有治: “レプリカ交換分子動力学法によるアミロイド前駆体蛋白質の膜貫通部位の二量体構造予測”, *BioSupercomputing Newsletter* **1**, 10 (2009).

口 頭 発 表 Oral Presentations

(国際会議等)

Sugita Y. and Miyashita N.: “Transmembrane Structures of Amyloid Precursor Protein Predicted by Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations”, *International Conference in Quantum Bio-Informatic Center 2009 (QBIC 2009)*, (Tokyo University of Science), Noda, Mar. (2009).

Re S., Jung J., Tenno S., and Sugita Y.: “QM/MM study on the reversible phosphorylation catalyzed by phosphoserine phosphatase (PSP)”, *13th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)*, (University of Helsinki), Helsinki, Finland, June (2009).

Re S., Jung J., Tenno S., and Sugita Y.: “On the mechanism of reversible phosphorylation catalyzed by phos-

phoserine phosphatase (PSP)”, *International Symposium on Theory of Molecular Structure, Function and Reactivity and CREST International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems*, (Kyoto University), Kyoto, July (2009).

Yoda T., Sugita Y., and Okamoto Y.: “Generalized-ensemble simulations of proteins in explicit solvent”, *Algorithms in MacroMolecular Modeling Conference*, (The University of Texas), Austin, USA, Nov. (2009).

Sugita Y.: “Multi-scale Simulations of Calcium Ion Pump and Phosphoserine Phosphatase”, *RIKEN Symposium on Molecular Ensemble 2009*, Wako, Dec. (2009).

Pisliakov A.: “Proton and ion transport in membrane proteins: How important is solvation?”, *Solvation of bioactive compounds: bridging theory, computation and experiment*, (Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences), Leipzig, Germany, Jan. (2010).

Mori T., Ogushi F., and Sugita Y.: “Voronoi analysis of lipid surface area in protein-membrane systems”, *Biophysical Society 54th Annual Meeting*, (Biophysical society), San Francisco, USA, Feb. (2010).

(国内会議)

宮下尚之, Straub J. E., 杉田有治: “アルツハイマー病に関わる膜蛋白質 APP の膜貫通部位の二量体構造予測”, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山, 11 月 (2008).

宮下尚之, Straub J. E., 杉田有治: “アミロイド前駆体蛋白質の膜貫通部位の二量体構造予測”, 日本生物物理学会第 46 回年会, 福岡, 12 月 (2008).

宮下尚之, 杉田有治: “アミロイド前駆体蛋白質の膜貫通部位の二量体構造予測”, 次世代スーパーコンピュータプロジェクト「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」シンポジウム: バイオスーパーコンピューティング・シンポジウム (BSCS)2008「新たな学問領域の創成に向けて」, 東京, 12 月 (2008).

杉田有治: “Molecular Dynamics Simulations of Soft Interactions at the Membrane Interface”, 特定領域研究「膜インターフェイス」平成 20 年度公開シンポジウム, (特定領域研究「生命秩序の膜インターフェイスを制御するソフトな分子間相互作用」), 豊中, 1 月 (2009).

杉田有治: “膜蛋白質の分子動力学計算”, 計算科学研究センター・ワークショップ「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」, (分子科学研究所), 岡崎, 1 月 (2009).

小串典子, 杉田有治: “二重膜における脂質分子の運動”, 日本物理学会第 64 回年次大会, (日本物理学会), 東京, 3 月 (2009).

李秀榮, Jung J., 天能精一郎, 杉田有治: “PSP リン酸転移反応の分子機構: 酸触媒機構”, 日本化学会第 89 春季年会, (日本化学会), 船橋, 3 月 (2009).

杉田有治: “膜タンパク質の分子動力学計算”, 第 57 期第 4 回日本材料学会分子動力学部門委員会, 京都, 3 月 (2009).

宮下尚之, 杉田有治: “拡張アンサンブル法によるアミロイド前駆体蛋白質の膜中での二量体構造予測”, 蛋白研セミナー「蛋白質のバイオスーパーコンピューティング」, 吹田, 3 月 (2009).

李秀榮, 鄭載運, 天能精一郎, 杉田有治: “2 段階リン酸転移を

- 含む触媒反応サイクルの QM/MM 計算”, 第 12 回理論化学討論会, (理論化学研究会), 東京, 5 月 (2009).
- 杉田有治, 森貴治: “膜蛋白質の構造変化に与える脂質分子の影響”, 第 12 回理論化学討論会, (東京大学), 東京, 5 月 (2009).
- Pisliakov A.: “Simulations of proton transfer in membrane proteins”, Seminar at the Biometal Science Laboratory, RIKEN SPRING-8 Center, Harima, 6 月 (2009).
- 宮下尚之, 前仲勝美, 杉田有治: “The differences in the binding mechanism of LILRB1/HLA-G and LILRB2/HLA-G”, 2009 年度計算科学合同ワークショップ, 横浜, 7 月 (2009).
- 李秀榮, 鄭載運, 天能精一郎, 杉田有治: “Two-dimensional energy surface of the enzymatic phosphoryl transfer reaction cycle: QM/MM calculation”, 2009 年度計算科学合同ワークショップ, 横浜, 7 月 (2009).
- 今井隆志, Kovalenko A., 平田文男, 木寺詔紀, 杉田有治: “3 次元 RISM 理論に基づく新しいリガンドマッピング法: フラグメントベースの薬物設計に向けた取り組み”, 次世代生命体統合 PJ 分子スケールワークショップ「ベタフロップスコンピューティングに向けた生体高分子シミュレーションの最前線」, (東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター), 東京, 8 月 (2009).
- 李秀榮, 今井隆志, 鄭載運, 天能精一郎, 杉田有治: “酵素触媒による可逆的リン酸化反応サイクルの QM/MM 計算”, 次世代生命体統合 PJ 分子スケールワークショップ「ベタフロップスコンピューティングに向けた生体高分子シミュレーションの最前線」, (東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター), 東京, 8 月 (2009).
- 宮下尚之, 杉田有治: “分子動力学計算を用いた LILRB1/HLA-G と LILRB2/HLA-G の結合機構の違い”, 次世代生命体統合 PJ 分子スケールワークショップ「ベタフロップスコンピューティングに向けた生体高分子シミュレーションの最前線」, (生産研), 東京, 8 月 (2009).
- 杉田有治: “細胞膜と膜蛋白質の分子動力学計算”, 蛋白研セミナー「膜蛋白質の機能発現メカニズムの解明に向けて: 細胞膜上での事象の解析」, (大阪大学蛋白質研究所), 吹田, 9 月 (2009).
- 杉田有治: “予測する生命科学・医療および創薬基盤”, 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2009, 東京, 10 月 (2009).
- Pisliakov A., Warshel A.: “How large are the contributions to catalysis from conformational motions?”, 第 47 回日本生物物理学会年会, 徳島, 10-11 月 (2009).
- 宮下尚之, 前仲勝美, 杉田有治: “Molecular dynamics simulation studies on the differences in the binding mechanism of LILRB1/HLA-G and LILRB2/HLA-G”, 第 47 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 徳島, 10-11 月 (2009).
- 小串典子, 杉田有治: “バルク脂質膜表面積を再現する膜タンパク質系の分子動力学シミュレーション法”, 第 47 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 徳島, 10-11 月 (2009).
- 今井隆志, 杉田有治: “タンパク質の高圧構造転移と水の侵入ダイナミクス”, 第 32 回溶液化学シンポジウム, (溶液化学研究会), 新潟, 11 月 (2009).
- 杉田有治: “超ベタフロップス級コンピュータと X 線自由電子レーザー (XFEL) の連携により実現する生物学の発展”, 第 5 回 X 線自由電子レーザーシンポジウム, 東京, 11 月 (2009).
- 杉田有治: “蛋白質折れ畳みと構造揺らぎに対する水和の影響”, 理研シンポジウム「動的水和構造と分子過程 III」, 播磨, 11 月 (2009).
- 小串典子, 杉田有治: “ボロノイ分割法に基づく膜タンパク質-脂質二重膜系の脂質表面積測定および構造モデリングへの応用”, 第 23 回分子シミュレーション討論会, (分子シミュレーション研究会), 名古屋, 11-12 月 (2009).
- 杉田有治: “拡張アンサンブル法の開発とタンパク質折れ畳みと機能の理解に向けた分子シミュレーション”, 第 23 回分子シミュレーション討論会, (分子シミュレーション研究会, 分子科学研究所), 名古屋, 11-12 月 (2009).
- 李秀榮, Jung J., 天能精一郎, 杉田有治: “酵素触媒によるリン酸化反応の分子シミュレーション”, 大阪大学タンパク質研究所セミナー, (理研, 横浜私立大学, 大阪大学蛋白質研究所), 横浜, 1 月 (2010).
- 森貴治, 小串典子, 杉田有治: “ボロノイ解析による膜タンパク質-脂質二重膜系の脂質表面積計算”, 大阪大学蛋白質研究所セミナー/次世代生命体統合シミュレーション研究開発プロジェクト分子スケールワークショップ「ベタスケールの生体分子シミュレーション」, (大阪大学蛋白質研究所), 横浜, 1 月 (2010).
- 杉田有治: “蛋白質の構造と機能を理解するための水の重要性: シミュレーションからの知見”, 第 17 回理事長ファンドワークショップ「水を意識した科学研究のあり方」—複合的な視点から新たな「水」像を構築する—, 修善寺, 2 月 (2010).
- 今井隆志, 宮下尚之, Kovalenko A., 平田文男, 木寺詔紀, 杉田有治: “Functionality Mapping in the Internal Cavities of Multidrug Transporter AcrB Based on 3D-RISM: Implications for Drug Efflux Pathway”, 第 2 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 東京, 3 月 (2010).
- 宮下尚之, Straub J. E., Thirumalai D., 杉田有治: “アミロイド β ペプチドの生成に関するシミュレーション研究”, 日本物理学会第 65 回年次大会, (日本物理学会), 岡山, 3 月 (2010).
- 森貴治, 岡本祐幸: “徐冷分子動力学法による Gramicidin A のフォールディング・シミュレーションおよび膜中での構造安定性”, 日本物理学会第 65 回年次大会, (日本物理学会), 岡山, 3 月 (2010).
- 今井隆志, 杉田有治: “分子動力学シミュレーションでみるタンパク質の高圧構造転移と水の侵入の動的相関”, 日本物理学会第 65 回年次大会, (日本物理学会), 岡山, 3 月 (2010).
- 李秀榮, 今井隆志, Jung J., 天能精一郎, 杉田有治: “タンパク質リン酸化反応の分子シミュレーション”, 日本化学会第 90 春季年会 (2010), (日本化学会), 東大阪, 3 月 (2010).
- 杉田有治, 宮下尚之, 今井隆志: “分子シミュレーションによる蛋白質の分子認識機構とドラッグデザインへの可能性”, 日本薬学会第 130 年会, (日本薬学会), 岡山, 3 月 (2010).