

IV. 生命科学研究部門

生命科学部門は生命機能情報分野、および、分子進化分野の2つの研究分野からなり、それぞれ、第一原理計算に基づく原子レベルでの酵素や DNA の機能解析、真核生物系統間の遺伝情報系統解析を独立に行ってきた。25 年度の終わりから密な共同研究体制を構築し、26 年度は定期的会合を行ってきた。

以下では、それぞれの部門の業績を個別に示す。

IV-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照 (センター勤務、数理物質系)
助教	庄司 光男 (センター勤務、数理物質系)
博士研究員	原田 隆平 (センター勤務、CREST)
学生	大学院生 2 名、学類生 3 名

2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 26 年度には、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)およびナイロン分解酵素における反応機構の解明を、高精度計算手法である量子/古典混合(QM/MM)法により行った。また、全原子分子動力学(MD)法により、タンパク質の折り畳み経路解析、トレオニン合成酵素における反応制御機構解明と、ウリジンシチジンキナーゼにおける基質認識機構の解明を行った。これらの研究には膨大な計算を高速に実行する必要があるため、スーパーコンピュータ(HA-PACS, COMA)の効率的利用に取り組んだ。センター内の共同研究として宇宙理論分野、ならびに、高性能計算分野と連携し、それぞれ系外惑星のバイオマーカーおよびアミノ酸生成過程、フラグメント分子動力学法の GPU 化に関する研究を推進した。

3. 研究成果

【1】タンパク質の折り畳みシミュレーション[文献 3, 6, 15]

タンパク質の機能発現に重要な構造変化は、通常分子動力学で追跡可能な時間より長時間の確率過程において観測される「レアイベント」である。本年度は、効率的なレアイベント探索のため、(1) 構造変化を誘起する可能性が高い初期構造選択と、(2) 短時間MDによる初期構造の構造リサンプリング過程から成る構造サンプリング手法を提案した。本手法で鍵となるのは、構造変化を誘起する可能性が高い初期構造を適切に選択することである。我々は、タンパク質の構造変化を記述する上で反応座標を定義し、それらに射影された高次元空間における「状態分布の端」に注目する。状態分布における密な領域はクラスタと呼ばれ、

準安定状態に対応する。一方、クラスタに属さない状態である「状態分布の端」は遷移状態になりうると仮定し、これらの出現頻度の低い「スパースな分布」をリサンプリングすることで、効率的に構造遷移を誘起できると考えた。クラスタに属さないスパースな分布である「はずれ値」に対応する状態を検出し、短構造リサンプリングを繰り返す“Outlier FLOODing Method (OFLOOD)”と呼ぶ構造サンプリング手法を提案した。

計算効率の検証として、OFLOODを速く折りたたむ典型的なタンパク質であるTrp-cageに適用したところ、ナノ秒オーダーの計算時間でフォールディング過程を抽出し、自由エネルギー解析を実行することに成功した。

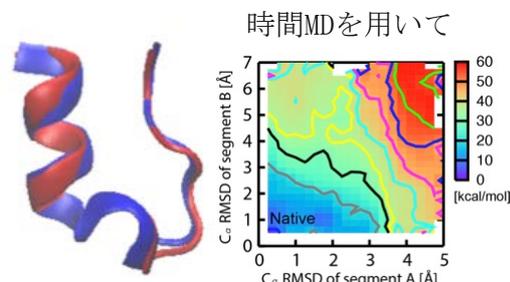


図1 Trp-cage の折りたたみ構造(青:実験, 赤:OFLOOD)と得られた自由エネルギー面

【2】ナイロン分解酵素の酵素反応制御機構の解明[文献 4, 7, 13 15]

酵素利用による物質生産や分解は、酵素の基質選択性に由来する高選択性、および、温和な条件下での反応の進行などの特徴から、低環境負荷の手法として期待されている。しかし、酵素の機能や物性は生体内環境に最適化されており、工業化するためには酵素の機能制御が不可欠である。近年分子生物学の発展によって、部位特異的アミノ酸変異実験を中心とした酵素デザインが盛んに行われており、多くのアミノ酸変異のデータが蓄積されている。しかしながら、その手法はランダム変異や結晶から得られた構造情報に基づく経験的なものであり、より効率的な酵素を設計するためにはその機能を詳細に知ることが肝要である。しかし、酵素反応は多段階かつ複雑である上、様々な素過程が存在する。典型的な素過程としては、図2に示すように、(1) ループ部位や基質などの移動により生じる構造変化、(2) 基質を認識する分子認識、(3) 基質に対する化学反応、(4) 反応後のすみやかな脱離である。従来の研究は、基質結合や酵素反応のエナジेटクスを中心になされているが、酵素の機能改善や設計指針を構築する上で、これら全ての情報を正確に記述することが重要である。本発表では、分子動力学 (MD) 法、QM/MM 分子動力学 (QM/MM MD) 法、ならびに、フラグメント分子軌道 (FMO) 法の各種理論計算手法を用いて、右図に構造を示したナイロンオリゴマー分解酵素 (Ny1B) の機能解析を行ない、アミノ酸残基を置換することによる基質結合・反応における影響を定量的に明らかにした。

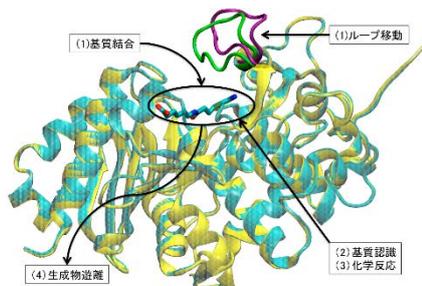


図2 酵素反応の素過程

【3】 光合成酸素発生中心の電子状態についての理論的研究 [文献 16, 17]

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに変換するシステムであり、生命の持つ重要なシステムの 1 つである。光合成は蛋白質の集合体で構成されており、各蛋白質は光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成（酸素固定反応）の働きを担っている。電子伝達系を担う光合成システム II では水を分解し酸素発生を発生する反応を行っている。



この反応では水から電子を引き抜くため、本反応は極めて難しく、洗練された化学反応機構が予想される。2011 年に沈教授（岡大）、神谷教授（大阪市大）により原子分解能(1.9 Å)の X 線構造解析がなされ、初めて活性中心構造とその周りの水分子の立体的配置が明らかとなった。OEC の活性中心は CaMn_4O_5 クラスタが歪んだ椅子型構造になっている。反応中間体におけるプロトン化状態については未だ明らかになっていない。

そのため我々は OEC の反応機構を解明する為、大規模量子古典混合法(QM/MM)法を用いて高精度理論解析を行った。OEC 構造における構造変化を EXAFS との結果と比較することで、反応中心(CaMn_4O_5 クラスタ)の構造特性、水素結合ネットワーク、及びプロトン化状態について考察した。

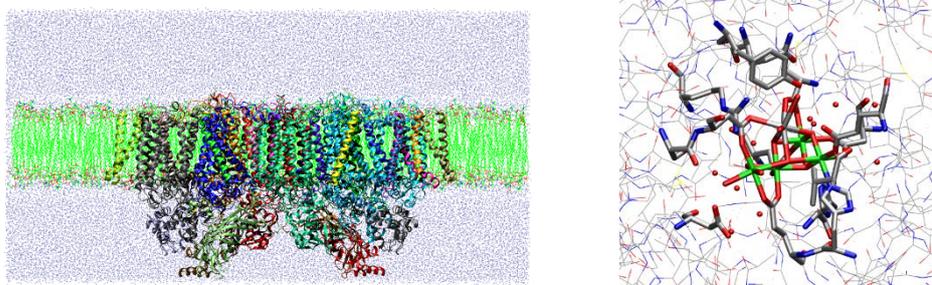


図 3 光合成システム II(左図)と水分解サイト(右図)

【4】 再構成ミオグロビンの円偏光二色性吸収特性[文献 21]

円偏光二色性吸収特性(CD)は蛋白質の構造解析において古くから調べられており、二次構造を容易に調べられる手法として良く知られている。ミオグロビン(Mb)は補因子としてポルフィリンを持ち、酸素貯蔵を行っている。Mb は Soret 帯にポルフィリン由来の特徴的な CD 吸収を持っている。近年、Woody らの理論解析により、Mb の Soret 帯の CD 吸収はポルフィリンのビニル基の配向により決定される事が示唆された。しかしながら、ビニル基をなくした合成ポルフィリンで再構成された Mb でも CD 吸収が発生する事が長井(法政大)、長友(筑波大)らの実験により示された。我々は長井、長友らと連携し、3つの合成ヘムについて理論解析

を行い、ポルフィリンのプロピオン酸残基の配向が CD 吸収に大きく影響する事を理論的に示した。本結果は、これまで定性的かつ指紋領域としてしか用いられていなかった CD 吸収特性が、実はポルフィリンの分子配向を大きく反映することを意味している。CD は X 線構造解析に比べ、測定が容易である。そのため、CD 測定は蛋白質全体の二次構造割合の決定のみならず、補因子の分子配向を解析できる手法になりうると予想される。

【5】宇宙生命計算（宇宙物理分野との共同研究）[文献 22, 23]

近年、系外惑星の発見が多く報告されてきている。ハビタブルゾーン内の惑星観測が成功し、地球に類似した惑星の発見もなされている。それに伴い、惑星のスペクトルから生命の痕跡（バイオマーカー）をいかに検出するかも非常に注目がなされている。バイオマーカーには様々な指標が提案されているが、red edge は、植物の反射スペクトル由来の近赤外領域（700-750nm）に見られる特徴的な急勾配である。この勾配の由来は様々なスケールでの要因が関わっているが、主要な要因としては光合成色素の 1 つであるクロロフィルの吸収スペクトルがある。

系外惑星における生命指標の可変性を明らかにするためには、地球における red edge 相当のスペクトルの環境依存性を明らかにすることが極めて重要と考えられる。まず始めに、主要な光合成色素の励起スペクトル計算を行い、系外惑星における植物の光吸収効率について考察をおこなった。また、光捕集システムの仕組み解明とその可変性について、光合成システムモデルを構築し、量子動力学計算により理論的検討をおこなった。

宇宙でのアミノ酸生成過程については様々な反応経路が考えられている。我々は、一般的な生成過程に対して反応物及び中間体の生成エネルギーの安定性を評価することで、宇宙におけるアミノ酸生成の仕組みの解明を試みた。ヒダントインやアミノニトリルを経由する、グリシンの生成過程について、第一原理計算（密度汎関数法）により反応機構を検討することで、宇宙空間でのグリシン生成機構について明らかにした。

4. 教育

〈修士論文〉

- ・ 氏家謙「トレオニン合成酵素における基質特異性決定過程の理論解明：熱力学積分法による自由エネルギー解析」
- ・ 田中弥「ウリジンシチジンキナーゼの基質認識機構についての理論的解明」

〈卒業研究〉

- ・ 張致遠「短時間主成分分析を用いたタンパク質運動モードの粗視化」

- ・パク・ジョンヒョク 「ヘムの円偏光二色性吸収特性についての理論的計算」
- ・田村奈々 「分子動力学法によるアミロイド形成過程の構造サンプリング」

【講義】

1. 重田育照
 - ・「計算物理学 2」(物理学類専門科目、春 ABC)
 - ・「計算物理学 3」(物理学類専門科目、秋 ABC)
2. 庄司光男
 - ・「生物物理学」(物理学類専門科目、春 ABC)

【集中講義】

1. 重田育照、金沢大学理学部計算科学科 学部学生 集中講義 (1 コマ)
2. 重田育照、大阪大学大学院基礎工学研究科 大学院前期課程 「物性反応量子化学」 (5 コマ)
3. 重田育照、大阪大学基礎工学部 学部 3 回生 「化学反応論」 (1 5 コマ)

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

- 1) 【受賞】 (賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日)

なし

- 2) 【外部資金】 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

＜研究代表者＞

1. 新学術領域研究「コンピューティクス」公募研究：重田育照 (代表者) (平成 2 5～2 6 年度) 「Si ナノドットの非線形光学特性変化に対する動力的解析」
2. 新学術領域研究「動的秩序と機能」公募研究：重田育照 (代表者) (平成 2 6 年度) 「キユミュラント粗視化動力学によるタンパク質動的秩序形成過程の理論研究」
3. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究：重田育照 (代表者) (平成 2 6～3 0 年度) 「理論と実験の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
4. 基盤研究 C：庄司光男 (代表者) (平成 2 6 年度～2 8 年度) 「トレオニン合成酵素の全反応機構の理論的解明」
5. 若手研究 (B)：原田隆平 (研究代表者) (平成 2 6 年～2 8 年度) 「タンパク質構造揺らぎに基づく構造変化予測法の構築」

＜分担研究者＞

1. 特別推進研究：庄司光男 (分担者) (代表者：沈建仁) (平成 2 4 年～2 8 年度) 「光合成系 II における水分解反応の学理解明」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Theoretical design of solvatochromism switching by photochromic reactions using donor-acceptor disubstituted diarylethene derivatives with oxidized thiophene rings”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 6484-6494 (2015). DOI: 10.1039/C4CP05946H
2. M. Kayanuma, K. Hanaoka, M. Shoji, Y. Shigeta, “A QM/MM Study of Initial Steps of Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase”, *Chemical Physics Letters* **623**, 8-13 (2015). DOI:10.1016/j.cplett.2015.01.039
3. R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, “Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins”, *Physical Chemistry Chemical Physics* (**invited feature article**) **17**, 6155-6173 (2015). DOI: 10.1039/C4CP05262E
4. H. Ando, Y. Shigeta, T. Baba, C. Watanabe, Y. Okiyama, Y. Mochizuki, M. Nakano, “Hydration Effects on Enzyme-Substrate Complex of Nylon Oligomer Hydrolase: Inter-Fragment Interaction Energy Study by the Fragment Molecular Orbital Method”, *Molecular Physics* **113**, 319-326 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.941311
5. R. Nakamura, Y. Shigeta, K. Okuno, M. Fukushima, M. Hasegawa, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, M. Nakano, “Substitution Effects on Optical Properties of Iminonitroxide-substituted Iminonitroxide Diradical”, *Molecular Physics* **113**, 267-273 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.937777
6. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins Based on the TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm: Application to the Folding of a Mini-protein, Chignolin”, *Journal of Computational Chemistry*, **36**, 763-772 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23854
7. T. Baba, M. Boero, K. Kamiya, H. Ando, S. Negoro, M. Nakano, Y. Shigeta, “Unraveling the degradation of artificial amide bonds in nylon oligomer hydrolase: from induced-fit to acylation processes”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17**, 4492-4504(2015). DOI: 10.1039/C4CP04419C
8. T. Matsui, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Shigeta, “Accurate Standard Hydrogen Electrode Potential and Applications to the Redox Potentials of Vitamin C and NAD/NADH”, *Journal of Physical Chemistry A*, **119**, 369-376 (2015). DOI: 10.1021/jp508308y

9. Y. Shigeta, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, “Quantal cumulant dynamics for real-time simulations of quantum many-body systems”, *International Journal of Quantum Chemistry* (**invited review**), **115**, 300-308 (2015). DOI: 10.1002/qua.24820
10. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, “Protein folding pathways extracted by Outlier FLOODing method (OFLOOD)”, *Journal of Computational Chemistry*, **36**, 97-102 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23773.
11. T. Baba, T. Matsui, K. Kamiya, M. Nakano, Y. Shigeta, “A density functional study on pKa of small polyprotic molecules”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **114**, 1128–1134 (2014). DOI: 10.1002/qua.24631
12. H. Fukui, S. Takamuku, T. Yamada, K. Fukuda, T. Takebayashi, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Open-Shell Character and Second Hyperpolarizabilities of One-Dimensional Chromium(II) Chains: Size Dependence and Bond-Length Alternation Effect”, *Inorganic Chemistry*, **53**, 8700-8707 (2014). DOI: 10.1021/ic501334p
13. T. Baba, R. Harada, M. Nakano, Y. Shigeta, “On the induced-fit mechanism of substrate-enzyme binding structures of Nylon-oligomer hydrolase”, *Journal of Computational Chemistry* **35**, 1240-47 (2014). DOI: 10.1002/jcc.23614
14. K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, T. Matsui, S. Negoro, Y. Shigeta, “A Nylon-oligomer Hydrolase Promoting Cleavage Reactions in Unnatural Amide Compounds”, *Journal of Physical Chemistry Letters* **5**, 1210-1216 (2014). DOI: 10.1021/jz500323y
15. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Fluctuation Flooding Method (FFM) for accelerating conformational transitions of proteins”, *Journal of Chemical Physics* **140**, 125103 (2014). DOI: 10.1063/1.4869594
16. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, M. Suga, F. Akita, J-R. Shen, K. Yamaguchi, “On the guiding principles for lucid understanding of the damage-free S₁ Structure of the CaMn₄O₅ cluster in the oxygen evolving complex of photosystem II”, *Chemical Physics Letters* **627**, 44-52 (2015). DOI: 10.1016/j.cplett.2015.03.033
17. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, M. Suga, F. Akita, J-R. Shen, K. Yamaguchi, “Theoretical studies of the damage-free S₁ structure of the CaMn₄O₅ cluster in oxygen-evolving complex of photosystem II,” *Chemical Physics Letters* **623**, 1-7 (2015). DOI:10.1016/j.cplett.2015.01.030
18. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umeda, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen, T. Nakajima and K. Yamaguchi, “Theoretical modeling of biomolecular systems I. Large-scale QM/MM calculations of hydrogen-bonding networks of the oxygen-evolving complex of

photosystem II”, *Molecular Physics* **113**, 359-384, (2015).

DOI:10.1080/00268976.2014.960021

19. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Large Scale QM/MM calculations of hydrogen bonding networks for proton transfer and water inlet channels for water oxidation. – Functional Theoretical modelings of the oxygen evolving complex of photosystem II”, *Advanced in Quantum Chemistry* **7**, 325-413 (2014). DOI:10.1016/bs.aiq.2014.10.001
20. M. Shoji, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “An Efficient Initial Guess Formation of Broken-Symmetry Solutions by using Localized Natural Orbitals”, *Chemical Physics Letters* **608**, 50-54 (2014). DOI: 10.1016/j.cplett.2014.05.063
21. M. Nagai, C. Kobayashi, Y. Nagai, K. Imai, N. Mizusawa, H. Sakurai, S. Neya, M. Kayanuma, M. Shoji, S. Nagatomo, “Involvement of Propionate Side Chains of the Heme in Circular Dichroism of Myoglobin: Experimental and Theoretical Analyses”, *Journal of Physical Chemistry B* **119**, 1275-1287 (2015). DOI: 10.1021/jp5086203
22. Y. Komatsu, M. Kayanuma, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, M. Umemura, “Light absorption and excitation energy transfer calculations in primitive photosynthetic bacteria”, *Molecular Physics* **113**, 1413-1421 (2015). DOI:10.1080/00268976.2014.998305
23. Y. Komatsu, M. Umemura, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Yabana, K. Shiraishi, “Light absorption efficiencies of photosynthetic pigments: the dependence on spectral types of central stars”, *International Journal of Astrobiology*, **14**, 505-510(2014). DOI:10.1017/S147355041400072X

B) その他執筆

1. 著書分担、4-1 節 (重田育照)、5-1 節 (庄司光男)、金属錯体の量子・計算化学、三共出版株式会社。ISBN: 9784782707098
2. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, “GPGPU クラスタ上での FMO 計算の性能評価”, (日本コンピュータ化学会 2014 秋季年会精選論文特集号) *Journal of Computer Chemistry Japan* (invited letter) **13**, 323-324 (2014) . DOI: 10.2477/jccj.2014-0053

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Y. Shigeta, “A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature”, *2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems*

- (WINDS), (**Invited**), Nov. 30th-Dec. 5th 2014, Hawaii, USA.
2. Y. Shigeta, “Protein Folding Processes Detected by Enhanced Sampling Techniques”, *19th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics*, (**Invited**), Nov. 11th-17th 2014, Tamsui, Taiwan.
 3. Y. Shigeta, “Towards Theoretical Design of Catalytic Activities of Enzymes”, *The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014*, (**Invited**), Nov. 11th-12th 2014, Sichuan University (SCU), Chengdu, China.
 4. Y. Shigeta, “First-principles analysis on enzymatic degradation of nylon”, *2nd World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering*, (**Invited**), Oct. 27th-29th 2014, Las Vegas, USA.
 5. Y. Shigeta, “Computational Studies on Redox Potential of Metal Complexes and Model Cofactors”, *International Conference on Synthetic Metals*, (**Invited**), June 30th-July 5th 2014, Turku, Finland.
 6. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “QM/MM study of the L-threonine formation reaction of threonine synthase: mechanism of the product-assisted catalysis”, *Computational Science Workshop 2014*, (**Invited**), August 20th-22nd 2014, Tsukuba.
 7. M. Shoji, “A development of the computational biosciences with supercomputers”, *AWEST2014*, (**Invited**), June 17th 2014, Awaji Island.

B) 一般講演

1. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “A QM/MM study of amide formation reaction of Nitrile Hydratase”, *The 53rd Annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Oct. 15th 2014, Poster.
2. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, “Theoretical investigation on the conformation-charge relationship of the photosystem II oxygen evolving complex (PSII-OEC)”, *The 53rd Annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Oct. 15th 2014, Poster.
3. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “QM/MM study on the L-threonine formation reaction of threonine synthase”, *QSCP XIX Taipei*, Poster, Nov. 17th 2014.
4. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “Theoretical study of the reaction mechanism of nitrile hydratase”, *Computational Science Workshop 2014*, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.
5. Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Shoji, R. Harada, M. Kayanuma, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “Free energy calculations of intermediate states of threonine synthase”, *Computational Science Workshop 2014*, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.

6. W. Tanaka, Y. Ujiie, F. Tomoike, M. Shoji, M. Kayanuma, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, “A theoretical study on interactions between uridine-cytidine Kinase and its Substrate”, *Computational Science Workshop 2014*, Tsukuba, Aug 21st 2014, Poster.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 重田育照、 “第一原理計算によるタンパク質の pK_a と構造機能相関”、日本物理学会シンポジウム「プロトネーション イントゥ ダークネス： 生体分子機能理解の為の水素位置情報」、早稲田大学、東京、2015/3/21-24.
2. 重田育照、「高分散分子動力学法によるタンパク質でのレアイベントの検出」、レアイベントの理論科学ワークショップ (招待)、日本原子力研究開発機構システム計算科学センター、千葉、2015/2/16.
3. 重田育照、「理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御」、新学術領域研究「高次複合光応答」第2回公開シンポジウム (招待)、千里ライフサイエンスセンター、大阪、2015/1/23-24.
4. 重田育照、「酵素活性制御に向けた多階層量子計算手法の応用」、理研シンポジウム「生体分子系量子化学計算の最前線」(招待)、理化学研究所、和光、2015/1/22-23.
5. 重田育照、「宇宙生命連携研究による物質進化過程の探索」27回理論懇シンポジウム (招待)、国立天文台、東京、2015/12/24-26
6. 重田育照、「第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン」、第8回 FMO 研究会 (CBI 学会 2014 年大会) (招待)、タワーホール船堀、東京、2014/10/28-30.
7. 重田育照、「CMD の発想に基づく生命物理の研究」第25回 CMD ワークショップ (招待)、国際高等研究所、京都、2014/9/1-5.
8. 重田育照、“計算化学による pK_a の高精度算出法”、第1回水和ナノ構造研究会 (招待)、奥平温泉、岩手、2014/8/28-29.
9. 庄司光男、“宇宙空間でのアミノ酸生成についての理論的研究”、実験・観測・計算シナジーによる自然界における生体分子の非対称性起源の解明 (招待)、自然科学研究機構、東京、2014/11/29.
10. 庄司光男、“QM/MM 法による酵素反応機構の理論的解明”、CUTE Mini-Workshop, 三重大学 (招待)、三重、2014/5/21.

B) その他の発表

1. 庄司光男、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、村川武、林秀行、重田育照、“QM/MM 法によるトレオニン合成酵素の反応制御機構の理論解明”、理論化学討論会、名古屋大学、愛知、口頭、2014/5/22.

2. 庄司光男、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、重田育照、村川武志、林秀行、“トレオニン合成酵素における生成物支援触媒機構解明のための精密自由エネルギー計算”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
3. 田中弥、氏家謙、友池史明、庄司光男、栢沼愛、増井良治、倉光成紀、重田育照、“ウリジンシチジンキナーゼ中のウリジンのプロトン化状態についての理論的研究”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
4. 氏家謙、田中弥、庄司光男、栢沼愛、重田育照、町田康博、村川武志、林秀行、“トレオニン合成酵素における反応中間体の自由エネルギー変化についての理論解析”、日本生化学会大会、京都、ポスター、2014/10/15.
5. 栢沼愛、庄司光男、重田育照、“ニトリルヒドラーゼの触媒機構に関する理論的研究”、分子科学討論会、ポスター、広島、2014/9/21.
6. 庄司光男、田中弥、氏家謙、栢沼愛、梅田宏明、重田育照、中野祥吾、片柳克夫、“同化型亜硝酸還元酵素における全化学反応の理論的解明”、分子科学討論会、広島、口頭発表、2014/9/21.
7. 梅田宏明、塙敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照、“GPGPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFM0 への組み込み”、分子科学討論会、広島、ポスター、2014/9/21.
8. 田中弥、氏家謙、友池史明、栢沼愛、増井良治、倉光成紀、庄司光男、“ウリジンシチジンキナーゼ基質のプロトン化状態についての理論的検討”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
9. 氏家謙、田中弥、栢沼愛、町田康博、村川武志、庄司光男、“熱力学積分法によるトレオニン合成酵素の基質結合自由エネルギー評価”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
10. 庄司光男、田中弥、氏家謙、栢沼愛、梅田宏明、中野祥吾、片柳克夫、“同化型亜硝酸還元酵素の反応機構の理論的解明”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
11. 原田隆平、鷹野優、重田育照、“蛋白質構造揺らぎを用いた構造変化加速法:FFM”、第 14 回蛋白質科学会、横浜、ポスター、2014/6/25-27.
12. 梅田宏明、庄司光男、塙敏博、朴泰祐、“GPGPU 化した Fock 行列計算ルーチンの OpenFM0 への組み込み”、日本コンピュータ化学会(春)、東工大、東京、2014/5/29-30.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1) 宇宙・生命・物性分野間連携 (宇宙生命)

宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する量子化学計算と系外惑星における光合成光捕集の

関係について研究を進展させた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1) 「金属タンパク質活性中心の機能における化学的環境の重要性-理論計算からのアプローチ」、講演者：北河康隆、計算生命科学 WG 第 4 回講演会、世話人：庄司光男、計算科学研究センター会議室 A、2014/6/18.
- 2) 「蛋白質構造と機能研究の分子シミュレーション計算アルゴリズム」、講演者：米澤康滋、計算生命科学 WG 第 5 回講演会、世話人：庄司光男、計算科学研究センター会議室 A、2014/11/29.

9. 管理・運営

なし

10. 社会貢献・国際貢献

プレスリリース

1. 「神奈川工科大と阪大、筑波大、兵庫県立大、仏 Strasbourg 大など、人工物質ナイロンオリゴマー分解酵素の反応の仕組みをスパコンで解明」日系バイオテク Online
<https://bio.nikkeibp.co.jp/article/news/20140419/175556/>

11. その他

なし