

誌 上 発 表 Publications

[雑誌]

(原著論文) \*印は査読制度がある論文誌

Yoda T., Sugita Y., and Okamoto Y.: "Hydrophobic Core Formation and Dehydration in Protein Folding Studied by Generalized-Ensemble Simulations", *Biophys. J.* **99**, 1637–1644 (2010). \*

Ahmad S., Yumlembam S. H., Paudel Y., Mori T., Sugita Y., and Mizuguchi K.: "Integrated prediction of one-dimensional structural features and their relationships with conformational flexibility in helical membrane proteins", *BMC Bioinfo.* **11**, 533-1–533-13 (2010). \*

Jung J., Sugita Y., and Tenno S.: "Moller-Plesset perturbation theory gradient in the generalized hybrid orbital quantum mechanical and molecular mechanical method", *J. Chem. Phys.* **132**, 084106-1–084106-6 (2010). \*

Imai T. and Sugita Y.: "Dynamic Correlation between Pressure-Induced Protein Structural Transition and Water Penetration", *J. Phys. Chem. B* **114**, No. 6, pp. 2281–2286 (2010). \*

Sugita Y., Ikeguchi M., and Toyoshima C.: "Relationship between  $\text{Ca}^{2+}$ -affinity and shielding of bulk water in the  $\text{Ca}^{2+}$ -pump from molecular dynamics simulations", *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107**, No. 50, pp. 21465–21469 (2010). \*

Re S., Imai T., Jung J., Tenno S., and Sugita Y.: "Geometrically Associative Yet Electronically Dissociative Character in the Transition State of Enzymatic Reversible Phosphorylation", *J. Comput. Chem.* **32**, No. 2, pp. 260–270 (2011). \*

(総説)

杉田有治: "京速コンピュータで実現する次世代の生命科学シミュレーション", *日本の科学者* **45**, No. 12, pp. 674–679 (2010).

口 頭 発 表 Oral Presentations

(国際会議等)

Pisliakov A. and Warshel A.: "How large are the contributions to catalysis from conformational motions?", International Symposium on Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems (RDMCS2009), (Kyoto University), Kyoto, June (2009).

Mori T.: "Molecular dynamics simulations of the SecY protein-conducting channel: Structure modeling and protein-lipid interactions", Telluride workshop on Protein and Peptide Interactions in Cellular Environments, (Telluride Science Research Center), Telluride, USA, July (2010).

Sugita Y.: "Replica-exchange molecular dynamics simulations of proteins in solution and in biological membrane", Telluride workshop on Protein and Peptide Interactions in Cellular Environments, (Telluride Science

Research Center), Telluride, USA, July (2010).

Sugita Y.: "Replica-exchange molecular dynamics simulations of proteins in solution and in membrane", 10th KIAS Conference on Protein Structure and Function, (Korea Institute for Advanced Study (KIAS)), Seoul, Korea, Sept.–Oct. (2010).

Hino T., Matsumoto Y., Pislakov A., Nagano S., Sugimoto H., Sugita Y., and Shiro Y.: "Molecular structures and mechanism of bacterial nitric oxide reductase", 3rd Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: - Experiments and Simulations, Jeju, Korea, Feb. (2011). (国内会議)

塚崎 智也, 森 博幸, 深井 周也, 石谷 隆一郎, 森 貴治, 堂前 直, Perederina A., 杉田 有治, Vassilyev D. G., 伊藤 維昭, 瀧 木 理: "細菌型 Sec トランスロコンの構造から明らかとなったタンパク質膜透過装置の構造変化", 第 9 回日本蛋白質科学会年会, 熊本, 5 月 (2009).

小串 典子, 石塚 玲子, 小林 俊秀, 杉田 有治: "Flip-flop motions of cholesterol, diacylglycerol, and ceramide in phospholipid bilayers", 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, 前仲 勝実, 杉田 有治: "The differences in the binding mechanism of LILRB1/HLA-G and LILRB2/HLA-G", 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).

小串 典子, 石塚 玲子, 小林 俊秀, 杉田 有治: "混合膜における脂質分子の運動と構造", 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, 鄭 載運, 天能 精一郎, 杉田 有治: "蛋白質リン酸化酵素の触媒機構に関する理論的研究", 第 13 回理論化学討論会, (理論化学研究会), 札幌, 5 月 (2010).

宮下 尚之, 前仲 勝実, 杉田 有治: "The differences in the binding mechanism of LILRB1/HLA-G and LILRB2/HLA-G 2", 第 10 回日本蛋白質科学会年会, (蛋白質科学会), 札幌, 6 月 (2010).

杉田 有治, 森 貴治: "生体膜と膜蛋白質の分子動力学計算", 第 10 回日本蛋白質科学会年会, (日本蛋白質科学会), 札幌, 6 月 (2010).

今井 隆志, 平田 文男, 杉田 有治: "Fragment-based drug design using the 3D-RISM ligand-mapping method: An application to FK506-binding protein", 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).

李 秀榮, 杉田 有治: "リン酸化触媒サイクルの分子シミュレーション", 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).

小串 典子, 石塚 玲子, 小林 俊秀, 杉田 有治: "Morphology transition of DAPC/DAG/W system from multilamellar structure", 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).

Pisliakov A., 杉田 有治: "Proton transfer pathways in cNOR revealed by MD simulations", 第 48 回日本生物物理学会年会, 仙台, 9 月 (2010).

杉田 有治: "Soft interactions between calcium pump (SERCA) and phospholamban (PLN)", 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).

- 宮下尚之, 池口満徳, 杉田有治: “The development of multi-dimensional replica-exchange molecular dynamics program (REIN)”, 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).
- 森貴治, 森田瑞樹, Shander A., 水口賢司, 杉田有治: “膜タンパク質系の分子動力学シミュレーションのための精密な構造モデリング法の開発”, 第 48 回日本生物物理学会年会, (日本生物物理学会), 仙台, 9 月 (2010).
- 杉田有治: “細胞動態の理解に向けた分子シミュレーション”, ASI-SPring8 生物系合同シンポジウム (2010), 和光, 9 月 (2010).
- 宮下尚之, 杉田有治: “レプリカ交換分子動力学法の生体分子への応用”, 第 127 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, (情報処理学会), 和光, 10 月 (2010).
- 杉田有治: “Relationship between  $\text{Ca}^{2+}$ -affinity and shielding of bulk water in the  $\text{Ca}^{2+}$ -pump rom molecular dynamics simulations”, シンポジウム「分子アンサンブル 2010」, 和光, 11 月 (2010).
- 杉田有治: “全原子分子動力学計算による膜輸送装置 Sec トランスロコンの構造変化の解析”, 第 33 回日本分子生物学会年会・第 83 回日本生化学会大会合同大会 (BMB2010), (日本分子生物学会/日本生化学会), 神戸, 12 月 (2010).
- Pisliakov A., 杉田有治: “Water channels and proton transfer pathways in nitric oxide reductase”, 理研シンポジウム「動的水和構造と分子過程 IV」, Wako, 12 月 (2010).
- 森貴治: “分子シミュレーションに基づく膜タンパク質の構造変化と脂質ダイナミクスの解析”, 次世代ナノ・連続研究会「イオンチャネル No. 2」, (次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ分野グランドチャレンジ研究開発 ナノ統合拠点), 福井, 12 月 (2010).
- 李秀榮, 山口芳樹, 杉田有治: “レプリカ交換分子動力学法による糖鎖及び水和構造の解析”, 水科学ワークショップ, 東京, 12 月 (2010).