

誌 上 発 表 Publications

[雑誌]

(原著論文) \*印は査読制度がある論文誌

Jaewoon J., Cheol C. H., Sugita Y., and Tenno S.: “New implementation of a combined quantum mechanical and molecular mechanical method using modified generalized hybrid orbitals”, *J. Chem. Phys.* **127**, 204102-1–204102-12 (2007). \*

Tsukazaki T., Mori H., Fukai S., Ishitani R., Mori T., Dohmae N., Anna P., Sugita Y., Vassilyev D., Ito K., and Nureki O.: “Conformational transition of Sec machinery inferred from bacterial SecYE structures”, *Nature* **455**, 988–992 (2008). \*

Ishitani R., Sugita Y., Dohmae N., Furuya N., Hattori M., and Nureki O.: “Mg<sup>2+</sup>-sensing mechanism of Mg<sup>2+</sup> transporter MgtE probed by molecular dynamics study”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105**, No. 40, pp. 15393–15398 (2008). \*

Sugita Y.: “Free-energy landscapes of proteins in solution by generalized-ensemble simulations”, *Front. Biosci.* **14**, 1292–1303 (2009). \*

Yukawa S., Shimada T., Ogushi F., and Ito N.: “Nonequilibrium Microscopic Distribution of Thermal Current in Particle Systems”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, No. 2, pp. 023002-1–023002-4 (2009). \*

(総説)

杉田有治: “生体分子の構造探索の理論”, *化学と工業* **61**, No. 6, pp. 582–584 (2008).

杉田有治: “カルシウムポンプの機能制御機構”, *生化学* **80**, No. 10, pp. 917–924 (2008).

杉田有治: “ぞくぞくとわかってきた膜を隔てたイオン輸送装置構造”, *生物物理* **48**, No. 6, pp. 330–332 (2008).

(その他)

Sugita Y., Mitsutake A., and Okamoto Y.: “Generalized-ensemble algorithms for protein folding simulations”, *Lect. Notes Phys.* **736**, 369–407 (2008).

口 頭 発 表 Oral Presentations

(国際会議等)

Sugita Y.: “Molecular Dynamics Simulations on the Conformational Stability of the Ca<sup>2+</sup>-binding sites in Ca<sup>2+</sup>-pump.”, BNL-RIKEN Life Science Workshop, Upton, USA, Sept. (2007).

Sugita Y.: “Molecular mechanism for stabilizing Ca<sup>2+</sup> at the transmembrane binding sites in Ca<sup>2+</sup>-pump”, 1st CMD International Symposium Chemical Computations, (Center for Space-Time Molecular Dynamics), Seoul, Korea, May–June (2008).

Jaewoon J., Cheol H. C., Sugita Y., and Tenno S.: “Recent developments in the generalized hybrid orbital (GHO) method”, 1st CMD International Symposium Chemical Computations, (Center for Space-Time Molecular Dynamics), Seoul, Korea, May–June (2008).

Mori T., Ishitani R., Nureki O., Tsukazaki T., and Sugita Y.: “Conformational transition of the Sec translocon induced by channel partner: A molecular dynamics study”, Biophysical Society 53rd Annual Meeting, Boston, USA, Feb.–Mar. (2009).

(国内会議)

杉田有治: “分子シミュレーションからカルシウムポンプの構造柔軟性を考える”, 日本生物物理学会第 45 回年会, 横浜, 12 月 (2007).

宗行英朗, 辻洋介, 杉田有治: “F1-ATPase ε サブユニットの分子動力学計算による研究”, 日本物理学会第 63 回年次大会, 東大阪, 3 月 (2008).

杉田有治: “カルシウムポンプの機能発現機構に関する分子動力学計算”, 日本物理学会第 63 回年次大会, 東大阪, 3 月 (2008).

杉田有治: “Toward a complete understanding of molecular mechanism of ion transport by membrane proteins”, 1st Joint Workshop on Computational Science, 和光, 7 月 (2008).

森貴治, 石谷隆一郎, 塚崎智也, 瀧木理, 杉田有治: “タンパク質膜透過装置 Sec トランスロコンの分子動力学シミュレーション”, 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2008, 東京, 9 月 (2008).

李秀栄, Jaewoon J., 天能精一郎, 杉田有治: “Mg<sup>2+</sup> 依存 PSP 酵素のリン酸転移反応: 分子機構とイオンの役割”, 第 2 回分子科学討論会 2008, (分子科学会), 福岡, 9 月 (2008).

杉田有治: “数理科学と生体分子シミュレーション”, 理事長ファンドワークショップ「数学・数理科学の推進と国際研究拠点の形成へむけて」, 那須, 9 月 (2008).

森貴治, 石谷隆一郎, 塚崎智也, 瀧木理, 杉田有治: “タンパク質透過チャネル SecY の分子動力学シミュレーション”, 第 22 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), 岡山, 11 月 (2008).

杉田有治: “Molecular Dynamics Study of Sarcoplasmic Reticulum Calcium Pump”, 第 31 回日本分子生物学会年会・第 81 回日本生化学会大会合同大会 (BMB2008), (日本分子生物学会, 日本生化学会), 神戸, 12 月 (2008).

森貴治, 石谷隆一郎, 塚崎智也, 瀧木理, 杉田有治: “分子動力学シミュレーションに基づくタンパク質透過チャネル SecY の構造・ダイナミクス解析”, 日本生物物理学会第 46 回年会, (日本生物物理学会), 福岡, 12 月 (2008).

杉田有治: “Protein-Lipid Interactions Revealed by Molecular Dynamics Simulations”, 九州大学次世代研究スーパー aster 養成プログラム公開シンポジウム, (九州大学次世代研究スーパー aster 養成プログラム), 福岡, 12 月 (2008).

杉田有治: “Molecular Dynamics simulations of protein dynamics in biological membrane”, 次世代ナノ情報機能・材料グループ成果報告会, (東北大学金属材料研究所), 仙台, 12 月 (2008).

杉田有治: “生体系の分子シミュレーション”, 第 2 回分子シミュレーションスクール: 基礎から応用まで, (分子科学研究所, 分子シミュレーション研究会), 岡崎, 12 月 (2008).

李秀栄: “On the anion shell hydrogen bond dynamics”, 理研シンポジウム「動的水和構造と分子過程 II」, 和光, 2 月

(2009).

森貴治, 石谷隆一郎, 塚崎智也, 濡木理, 杉田有治: “分子動力学シミュレーションによるタンパク質透過チャネル SecY の構造変化・機能メカニズム解明”, 日本物理学会第 64 回年次大会, (日本物理学会), 東京, 3 月 (2009).