

奥村久士(准教授)(2009年5月1日着任)

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

- a) ペプチドのマルチパーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーション
- b) ペプチドの部分的マルチカノニカル分子動力学シミュレーション
- c) 高速分子動力学プログラム GEMB の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) マルチカノニカル法は生体分子の多くの構造を強力に探索する方法であるが，体積を一定に保つので圧力を指定できないし体積変化をとまなう現象を扱うこともできない。この問題を解決するためにマルチパーリック・マルチサーマル法を提案した。従来の方法では正しく計算できないような多くの自由エネルギー極小状態を持つ系でもこの方法では加熱，加圧による物性の変化を正しく調べることができる。この方法を用いて水中のアラニンジペプチドにおける各構造間の部分モルエンタルピー差 ΔH と部分モル体積差 ΔV を計算したところ，ラマン散乱の結果と良く一致した。 ΔH と ΔV は各構造の存在確率がそれぞれ温度，圧力とともにどのように変化するかを示す重要な物理量である。これらの物理量を分子シミュレーションで求めたのは本研究が初めてである。
- b) マルチカノニカル法のもう1つの問題点として，大きな系ではポテンシャルエネルギーの分布が $1/\sqrt{N}$ (N は粒子数) に比例して鋭くなるので事前に重み因子を決めるのが難しくなる。そこで部分的マルチカノニカル法を提案した。この方法では多くの構造をサンプルするのに重要なポテンシャルエネルギー項についてだけ広くサンプルする。このため重み因子を決定するための労力を節約できるので，より効率的に構造サンプリングができる。実際この方法を水中のアラニンジペプチドに適用したところ，マルチカノニカル法よりも部分的マルチカノニカル法の方がより多くの構造を効率的に探索できることがわかった。
- c) これまで独自の高速分子動力学シミュレーションプログラム Generalized-Ensemble Molecular Biophysics (GEMB) プログラムを開発してきた。このプログラムには以下のような特徴がある。これらの特徴を全て備えたプログラムは他にはない。
 - (1) 拡張アンサンブル分子動力学法により多くの構造を効率よく探索できる。
 - (2) シンプレクティック解法を用いているのでシミュレーションを安定に実行できる。
 - (3) 多時間ステップ法を使って高速にシミュレーションを行う。

B-3) 総説，著書

奥村久士，「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御第2回：シンプレクティック解法と能勢・ポアンカレ熱浴」アンサンブル 11, No. 1, 35 (2009).

奥村久士，「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御第3回：速度スケーリング法，ガウス束縛法，ベレンゼン熱浴」アンサンブル 11, No. 2, 43 (2009).

奥村久士，「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御第4回：アンダーセンの方法と能勢・アンダーセンの方法」アンサンブル 11, No. 3, 22 (2009).

奥村久土,「分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御第5回:パリネロ・ラーマンの方法,圧力一定のガウス束縛法,圧力一定のベレンゼンの方法」アンサンブル 11, No. 4, 26 (2009).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “Multibaric-multithermal and partial multicanonical molecular dynamics simulations of alanine dipeptide,” 2nd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences Experiments and Simulations, Nagoya (Japan), December 2009.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulations for biomolecules,” The 4th Winter School of JSPS Asian CORE Program for Frontiers of Materials, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences, Seoul (Korea), December 2009.

H. OKUMURA, “Recent progress in generalized-ensemble molecular dynamics simulations for biomolecules I,” International Workshop on Biophysics and Complex Systems 2009, Taipei (Taiwan), December 2009.

H. OKUMURA, “Recent progress in generalized-ensemble molecular dynamics simulations for biomolecules II,” International Workshop on Biophysics and Complex Systems 2009, Taipei (Taiwan), December 2009.

H. OKUMURA, “Comparisons between molecular dynamics simulation and hydrodynamics calculation: Nonequilibrium thermal processes and a bubble creation,” Seminar at Department of Mechanical Engineering, Imperial College London, London (U.K.), September 2009.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulation of a peptide by GEMB program I,” 2009 NCTS June Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), June 2009.

H. OKUMURA, “Generalized-ensemble molecular dynamics simulation of a peptide by GEMB program II,” 2009 NCTS June Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Taipei (Taiwan), June 2009.

奥村久土,「新しい拡張アンサンブル分子動力学法の生体系への応用:マルチバーリック・マルチサーマル法と部分的マルチカノニカル法」九州大学大学院理学府化学専攻, 2009年11月.

B-8) 競争的資金

文部科学省科研費若手研究(B),「ナノスケールの非定常流を記述する流体力学の統計力学的検証」奥村久土 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

私がこれまでに開発した部分的マルチカノニカル法や剛体分子のシンプレクティック解法を用いれば全原子モデルでのタンパク質の折りたたみシミュレーションが実現できるのではないかと考えている。そこでプロテインGの折りたたみシミュレーションに挑戦したい。これは56残基からなるタンパク質で α ヘリックス構造と β シート構造の両方を持っている。このシミュレーションをおこない、全原子モデルによるタンパク質の折りたたみを世界で初めて成功させたい。また、フォールディング病の原因タンパク質の研究もおこないたい。フォールディング病の1つである透析アミロイドーシスの原因は β_2 ミクログロブリンである。最近の実験的によるとアミロイド形成時には29番目のグリシン残基が反転している。この実験に対応するシミュレーションをおこない、何が原因なのか解明したい。またマルチバーリック・マルチサーマルシミュレーションをおこない高圧下での構造変化も議論したい。