

「生体分子シミュレーション・モデリング」サブグループ 研究会開催報告

2025/10/3

「生体分子シミュレーション・モデリング」サブグループの研究会、第5回生体分子シミュレーション・モデリング研究会を、生物物理学会年会前日の2025年9月23日に、年会会場でもある奈良県コンベンションセンター（201号室E会場）にて開催しました。当日は、招待講演2件と参加者から募った一般講演7件（うち学生による講演5件）、参加者38名となり、当分野の多様な研究者・学生が大いに議論し交流を深めることができました。

招待講演では、京都大学の荒木望嗣先生にスーパーコンピュータ「富岳」を活用したスペコン創薬の現状についてお話しいただきました。また、静岡県立大学の渕上壮太郎先生には、メソスケール実験の観測と協奏を目指した粗視化モデル開発についてお話しいただきました。

新しい試みとして、今回は学生優秀発表賞のコンペをおこないました。学部生から博士課程大学院生まで5名の応募があり、どれも意欲に満ちた良い研究発表でした。審査員5名で審査・投票の上、僅差ではありましたが、

- ・関 健仁（総合研究大学院大学）
- ・手代木 陽介（東京大学）
- ・山田 哲平（岡山大学）

の3名の発表が学生優秀発表賞として選出され、ホームページにて報告いたしました。



今回も、アメリカ生物物理学会のサブグループを参考に、年会開催に紐付けた年会前日の開催とし、サブグループの専門分野について深く議論する場を提供することを目的としました。出席は難しい方もおられましたが、年会前日に久しぶりに近い分野の研究者が集

まる機会が得られた点、また、学生やポスドクの若い研究者に口頭発表の場を設けた点で、参加者の皆様から好評を得ることができました。

参考 URL:

研究会ホームページ <https://sites.google.com/lsm.org/lsm05/>

以下、講演者とタイトルなどをまとめました開催プログラムを示します（敬称略）。

プログラム

9月23日（火）

13:55 – 14:00 開会挨拶・趣旨説明 山下 雄史（星薬科大学）

14:00 – 14:30 招待講演1 荒木 望嗣（京都大学大学院医学研究科）

「分子シミュレーションに基づく次世代創薬計算技術の開発とゲノム医療への応用」

14:30 – 14:50 演題1 肥喜里 志門（立命館大学生命科学部）

「End-Point 結合自由エネルギー計算法による MDM2-MIP 高結合親和性の解明」

14:50 – 14:55 休憩（short break）

14:55 – 15:25 招待講演2 渕上 壮太郎（静岡県立大学薬学部）

「ミオシンVの分子モデル構築と歩行運動の粗視化シミュレーション」

15:25 – 15:45 演題2 久保 進太郎（理化学研究所）

「F1-ATPase の角度依存キネティクスモデルの構築と検証」

15:45 – 16:00 休憩（short break）写真撮影

16:00 – 16:20 演題3 山田 哲平（岡山大学環境生命自然科学研究科）

「細胞膜の非対称性と不均一性」

16:20 – 16:40 演題4 宗像 里佳（星薬科大学薬品物理化学研究室）

「VHH D2-L29 の変異による親和性増強に寄与する抗原-抗体相互作用の非局所的変

化：MD シミュレーションと MM-PBSA 熱力学解析」

16:40 – 16:45 休憩（short break）

16:45 – 17:05 演題5 神山 幸成（早稲田大学先進理工学部）

「動的水チャネルを介したべん毛モーターの回転運動の全原子分子動力学解析」

17:05 – 17:25 演題6 関 健仁（総合研究大学院大学）

「Na⁺輸送性 NADH-キノン酸化還元酵素 Na⁺-NQR の構造ダイナミクス研究」

17:25 – 17:45 演題7 手代木 陽介（東京大学）

「タンパク質の形状を考慮した剛体多体系のシミュレーションソフトウェア CGRig の開発」

17:45 – 18:00 自由討論（free discussion）

18:00 – 18:05 閉会挨拶 森 俊文（九州大学）

終了後、意見交換会。

世話人

山下雄史（代表、星薬科大学）

森俊文（副代表、九州大学）

森次圭（大阪公立大学）

高田彰二（京都大学）