

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：11301

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05781

研究課題名(和文)時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発

研究課題名(英文)Reaction initiation techniques in time-resolved experiments

研究代表者

南後 恵理子(Nango, Eriko)

東北大学・多元物質科学研究所・教授

研究者番号：90376947

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 114,600,000円

研究成果の概要(和文)：X線自由電子レーザーを用いた時分割シリアルフェムト秒結晶構造解析は、高い時間・空間分解能でタンパク質動的構造を得ることができる現在唯一の方法である。特に光励起による時分割実験では多くの成功を収めている。しかし、多くのタンパク質は光非励起性であり、汎用的な反応開始方法の技術開発が必要である。本課題では、主に温度上昇を利用する温度ジャンプ法や基質添加を起点とする二液混合実験の開発に取り組んだ。また結晶の制限のない溶液を用いた実験を可能とするため、X線自由電子レーザーによる溶液散乱法の開発を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

時分割SFXはその高い空間・時間分解能から、これまで原子分解能で追うことのできなかった化学反応などの早い反応の追跡に適している。従って、従来得られなかった構造的及び化学的な知見を得られることが期待される。本班はこうした動的な構造変化を可視化するための技術の確立を目指すだけでなく、本領域のAO1から提供される数多くのタンパク質試料の動的構造解析の促進に貢献できる。また、ケミカルバイオロジーや計算科学の班と連携することにより、本法を更に発展させることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Time-resolved serial femtosecond crystallography (SFX) using an X-ray free electron laser is currently the only method that can obtain protein dynamic structures with high temporal and spatial resolution. In particular, time-resolved SFX using a pump laser has led to successful results. However, most of proteins are photo non-excitabile, and it is necessary to develop a versatile reaction initiation technique. In this project, we worked on the development of a temperature jump method for SFX and "mixed and inject" SFX experiments by rapid mixing of substrates. We also developed a solution scattering method using an X-ray free electron laser to overcome the limitations imposed by crystals.

研究分野：X線結晶構造解析

キーワード：X線自由電子レーザー 時分割実験 溶液散乱 温度ジャンプ 結晶構造解析

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

X線自由電子レーザー (XFEL) によるタンパク質結晶構造解析は、2011年 Chapman らによるシリアルフェムト秒結晶構造解析 (SFX) の報告 (Chapman et al. Nature 2011) を皮切りに、続いてタンパク質が構造変化する過程を捉える“時分割実験”も行われるようになった。SFX法では、微結晶を結晶輸送装置より連続してXFEL照射領域に送り、ランダムな方位にある多数の結晶からの回折像を記録して構造を得る。高強度のフェムト秒 X線パルスレーザーにより、放射線損傷が顕在化する前に回折現象が終了することから、損傷回避のための極低温下での測定が不要であり、室温下での構造情報を得ることができる。更に、数10フェムト秒の時間分解能で反応や動きを捉えることも可能である。このようなタンパク質動的構造解析は他に例がなく、原子レベルでタンパク質中の反応や構造変化を追跡できると非常に期待されている。研究代表者の南後は、XFEL施設SACLA(日本)におけるSFX法の技術開発に携わり、2016年には光駆動型プロトンポンプであるバクテリオロドプシンがナノ秒からミリ秒にかけて構造変化する様子を動画の様に捉えるに至った (Nango et al. Science 2016)。

今まで行われてきた時分割SFX実験は、主に光で反応するタンパク質を標的として、光による反応誘起方法が用いられてきた。この方法は、結晶内タンパク質分子の反応を一斉に開始することができるために反応の制御が容易である。しかし、生体内に存在するタンパク質の大半は、基質、リガンドといった低分子によって反応を開始しており、他には pH や温度変化といった刺激により機能発現や構造変化を起こすタンパク質なども知られている。時分割SFX構造解析は非常に新しい研究分野であることから、光以外の物理的刺激や基質などの低分子による反応開始方法はあまり確立されておらず、こうした技術の確立は喫緊の課題であった。

2. 研究の目的

そこで我々は温度や pH の変化、基質添加等による多様な反応誘起方法の技術開発を行い、時分割SFX実験に適用することで、様々なタンパク質における反応過程や構造変化の原子レベルでの追跡を可能にすることを目指す。高い時間・空間分解能の動的構造が得られると、生命科学の深化だけでなく、その情報を基に新たな分子設計に貢献することが期待される。

本研究計画班は、本領域において研究基盤を支え、技術開発の中心的役割を担う位置づけにある。A01が標的とする試料には光励起型でないものもあることから、本班が開発する光以外の物理または化学的刺激による反応誘起システムは、A01グループの成果創出に貢献すると期待できる。また、C01グループの久保班とは技術開発を連携し、計算科学班には本班で得られたタンパク質構造データを提供することにより、一体となって本領域を発展させる。B01山本班、足立班は相補的な関係にあり、連携することによって成果創出を目指す。

測定装置・技術の開発側と測定者側の間にはしばしば大きな隔たりが生じることがある。開発初期では、安定且つ大量に得られるモデル試料で装置・技術開発が進められることが多く、実際に測定したい試料においては様々な技術的困難さを伴うことがある。本領域では、試料を調製・解析するA01グループと測定基盤を構築する本班が連携しながら装置・技術開発を進めるため、真に詳細な解明が望まれる試料での動的構造解析が達成されると期待される。

3. 研究の方法

(1) 物理刺激の中でも制御が比較的容易な「温度」に着目し、新たな反応誘起方法の開発に取り組む。温度を利用する反応誘起法では、水の近赤外線吸収特性による温度上昇を活用し、赤外線レーザーによる温度ジャンプ-SFX法の技術開発を行う。

(2) 結晶溶液と基質溶液を瞬時に混合し、XFEL照射領域まで結晶を輸送する二液混合型実験装置の開発を行う。具体的な方法としては、二液の混合が速やかに行うことができる流路を利用した系で検討を始め、マイクロ～ミリ秒の間に起こる反応を観察することを目指す。試料の中には遅い時間(秒～分)で構造変化を起こすものも想定されることから、遅い反応観測にも対応した装置開発も検討する。

(3) 一方、結晶中の分子パッキングなどによる構造変化の制限など、結晶特有の問題が起こることも予想されることから、タンパク質溶液を測定試料とする溶液散乱法によるタンパク質構造変化解析にも取り組む。X線溶液散乱では主に小角領域の観測が行われ、分子外形の情報が得られるという利点がある。中高角領域において統計精度の高いデータを得るには、高強度のX線を試料に照射するか、露光時間を長くする必要があるが、そうすると試料への放射線損傷が避けられない。超高強度フェムト秒X線パルスの特性を持つXFELを用いた溶液散乱実験が可能となると、放射線損傷の影響なしで高い空間分解能のデータを得ることが期待できる。また、二液混合法と組み合わせることで、基質等の結合に誘起されるタンパク質構造変化を捉えることも可能であり、新たなタンパク質動的構造解析法の確立が期待される。

4. 研究成果

初年度では、X線自由電子レーザー (XFEL) を用いた計測技術の開発だけでなく、計算科学関連の分担者を追加して実施した。当初計画では、計算科学に特化した班を設けていたが計

画研究代表が死去し班が消失したため、初年度は応急処置として本班に計算科学を組み込んで実施した。次年度からは新たな代表の下で計算科学の計画研究班を実施することになり、本班は計画通り XFEL 計測の研究を実施した

計算科学を用いた研究は、(1) XFEL 時分割データからの構造モデリングに分子動力学法を活用する手法の開発、(2) 酵素反応機構の理論解析、(3) 古細菌膜に埋め込まれたバクテリオロドプシンの光反応過程の分子動力学シミュレーションの3つについて行った。(1)については、シミュレーションから得られる分子の運動と実験から得られている構造モデルや電子密度の詳細な比較を行い、アルゴリズム開発に資する情報を得た。(2)は、アミン酸化酵素であるサルコシンオシキダーゼの反応機構を理論解析し、フラビンによるアミン酸化の普遍的活性化機構を見出すに至った。(3)は、古細菌の細胞膜脂質に特有の L-glycerol 結合を持つ脂質の高精度な分子力場を作成し、古細菌脂質二重膜でバクテリオロドプシンを囲んだリアリステックモデルを構築し、数マイクロ秒の分子動力学シミュレーションを実行し、XFEL 時分割データとの比較を行った。

溶液散乱実験については、測定装置開発を行うと共に解析ソフトウェアの開発を行い、実際にベヘン酸銀、ニワトリ卵白アルブミン、ウマ心筋チトクロム C などを用いて実験を実施した。本来、溶液試料による小角 X 線散乱測定では、観測可能な最も低角となるビームストッパー付近のビーム強度が最大となるはずだが、その領域の強度が近接する広角側と比べて低くなっていた。この現象に対する原因は、XFEL により試料溶液が蒸発し、ダイレクトビーム周辺に生じた水蒸気の影響で散乱強度が減衰しているのでは無いかと推測された。その状況の検証と緩和のためにヘリウムガスの流量など種々検討を行った。また、流路型二液混合インジェクターを用いた混合実験も実施し、時間に応じて変性構造への変化を示す散乱曲線の変化が観測された。更に、データの S/N 向上を目指して FEL からのビーム強度変動やポンプによる試料流の脈動などへの対応を自動化するために、新たに検定統計量に基づく評価アルゴリズムを開発導入した。事前に設定した閾値や各種条件に基づき、データの取舍選択を自動判定して処理することが可能となった。Windows で動作する GUI 版に加えて、新たにコマンドラインベースで動作する Linux 版を開発し、フォルダ監視機能により測定中のデータを連続的に並列自動処理することも可能となった。

温度を反応開始剤とする実験方法の開発では、近赤外線レーザーを用いた温度ジャンプ測定系の開発を行った。温度上昇量の定量的評価を行うため、水の近赤外吸収特性を応用して、一般的なサーモグラフィカメラの露光時間と比較して極めて早い時間応答を持つナノ秒時間分解顕微イメージング装置を開発した。本装置の実証実験として、中心波長 1450 nm のナノ秒レーザーを液体ジェット(水)に照射したところ、水の温度上昇を確認することができた。また、近赤外レーザーを照射する前の試料温度を一定に保つため、試料吐出部分の温度保持装置の開発も併せて行った。実際にタンパク質結晶を用いて温度ジャンプ時分割 SFX 実験を実施し、結晶格子長の変化やタンパク質構造の変化を観察するに至った。

二液混合実験においては、流路を用いた実験系で酵素を用いた時分割実験を実施し、活性部位に基質や補酵素が結合していく瞬間を捉えることができた。また、必要試料削減を目的とし、二種の液滴を混合してベルトコンベアで XFEL 照射領域まで輸送するベルトコンベア型試料輸送装置を開発し、ポンププローブ実験並びに二液混合実験を実施して、反応開始後のタンパク質の構造変化が本装置にて明確に捉えられることを実証した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計39件（うち査読付論文 39件 / うち国際共著 14件 / うちオープンアクセス 26件）

1. 著者名 Araya Tsuyoshi, Matsuba Yuya, Suzuki Harufumi, Doura Tomohiro, Nuemket Nipawan, Nango Eriko, Yamamoto Masaki, Im Dohyun, Asada Hidetsugu, Kiyonaka Shigeki, Iwata So	4. 巻 695
2. 論文標題 Crystal structure reveals the binding mode and selectivity of a photoswitchable ligand for the adenosine A2A receptor	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Biochemical and Biophysical Research Communications	6. 最初と最後の頁 149393 ~ 149393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrc.2023.149393	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Li Hongjie, Nakajima Yoshiki, Nango Eriko, ..., Suga Michihiro, Shen Jian-Ren	4. 巻 626
2. 論文標題 Oxygen-evolving photosystem II structures during S1-S2-S3 transitions	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 670 ~ 677
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41586-023-06987-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Maeki Masatoshi, Kimura Niko, Okada Yuto, Shimizu Kazuki, Shibata Kana, Miyazaki Yusuke, Ishida Akihiko, Yonezawa Kento, Shimizu Nobutaka, Shinoda Wataru, Tokeshi Manabu	4. 巻 6
2. 論文標題 Understanding the effects of ethanol on the liposome bilayer structure using microfluidic-based time-resolved small-angle X-ray scattering and molecular dynamics simulations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nanoscale Advances	6. 最初と最後の頁 2166 ~ 2176
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3NA01073B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Satoshi, Kise Yoshiaki, Yonezawa Kento, Inoue Mariko, Shimizu Nobutaka, Nureki Osamu, Inaba Kenji	4. 巻 15
2. 論文標題 Structure of full-length ERGIC-53 in complex with MCFD2 for cargo transport	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 2404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-024-46747-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Inaba Hiroaki, Shisaka Yuma, Ariyasu Shinya, Sakakibara Erika, Ueda Garyo, Aiba Yuichiro, Shimizu Nobutaka, Sugimoto Hiroshi, Shoji Osami	4. 巻 14
2. 論文標題 Heme-substituted protein assembly bridged by synthetic porphyrin: achieving controlled configuration while maintaining rotational freedom	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 8829 ~ 8836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D4RA01042F	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Choudhury Jagrity, Yonezawa Kento, Anu Anu, Shimizu Nobutaka, Chaudhuri Barnali	4. 巻 52
2. 論文標題 SAXS/WAXS data of conformationally flexible ribose binding protein	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Data in Brief	6. 最初と最後の頁 109932 ~ 109932
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dib.2023.109932	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Safari Cecilia, Ghosh Swagatha, Andersson Rebecka, ..., Iwata So, Neutze Richard, Branden Gisela	4. 巻 9
2. 論文標題 Time-resolved serial crystallography to track the dynamics of carbon monoxide in the active site of cytochrome c oxidase	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eadh4179
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.adh4179	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Maestre-Reyna Manuel, Wang Po-Hsun, Nango Eriko, ..., Royant Antoine, Bessho Yoshitaka, Essen Lars-Oliver, Tsai Ming-Daw	4. 巻 382
2. 論文標題 Visualizing the DNA repair process by a photolyase at atomic resolution	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science	6. 最初と最後の頁 eadd7795
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/science.add7795	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 中田國夫, 柏木立己, 南後恵理子, 岩田想	4. 巻 34巻10号
2. 論文標題 X線自由電子レーザーで捉えたピフィズス菌酵素の常温構造	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 光アライアンス (Optical Alliance)	6. 最初と最後の頁 1 - 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Birch James, Kwan Tristan O. C., Judge Peter J., Axford Danny, Aller Pierre, Butryn Agata, Reis Rosana I., Bada Juarez Juan F., Vinals Javier, Owen Robin L., Nango Eriko, Tanaka Rie, Tono Kensuke, Joti Yasumasa, Tanaka Tomoyuki, Owada Shigeki, Sugahara Michihiro, Iwata So, Orville Allen M., Watts Anthony, Moraes Isabel	4. 巻 56
2. 論文標題 A versatile approach to high-density microcrystals in lipidic cubic phase for room-temperature serial crystallography	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Crystallography	6. 最初と最後の頁 1361 ~ 1370
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600576723006428	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Wolff Alexander M., Nango Eriko, Young Iris D.,, Fraser James S., Thompson Michael C.	4. 巻 15
2. 論文標題 Mapping protein dynamics at high spatial resolution with temperature-jump X-ray crystallography	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Chemistry	6. 最初と最後の頁 1549 ~ 1558
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41557-023-01329-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hutchison Christopher D. M., Baxter James M., Fitzpatrick Ann,, Iwata So, Boxer Steven G., Groenhof Gerrit, van Thor Jasper J.	4. 巻 15
2. 論文標題 Optical control of ultrafast structural dynamics in a fluorescent protein	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Chemistry	6. 最初と最後の頁 1607 ~ 1615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41557-023-01275-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nango Eriko, Iwata So	4. 巻 81
2. 論文標題 Recent progress in membrane protein dynamics revealed by X-ray free electron lasers: Molecular movies of microbial rhodopsins	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Current Opinion in Structural Biology	6. 最初と最後の頁 102629 ~ 102629
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.sbi.2023.102629	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fadini Alisia, Hutchison Christopher D.M., Morozov Dmitry, ..., Iwata So, Boxer Steven G., Groenhof Gerrit, Nango Eriko, van Thor Jasper J.	4. 巻 145
2. 論文標題 Serial Femtosecond Crystallography Reveals that Photoactivation in a Fluorescent Protein Proceeds via the Hula Twist Mechanism	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 15796 ~ 15808
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c02313	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shimokawa Michiko, Ishiwata Akihiro, Kashima Toma, ..., Ito Yukishige, Fushinobu Shinya, Fujita Kiyotaka	4. 巻 14
2. 論文標題 Identification and characterization of endo- , exo- , and exo- -d-arabinofuranosidases degrading lipoarabinomannan and arabinogalactan of mycobacteria	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-41431-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Jiang Xuguang, Ogawa Tadayuki, Yonezawa Kento, Shimizu Nobutaka, Ichinose Sotaro, Uchihashi Takayuki, Nagaike Wataru, Moriya Toshio, Adachi Naruhiko, Kawasaki Masato, Dohmae Naoshi, Senda Toshiya, Hirokawa Nobutaka	4. 巻 24
2. 論文標題 The two step cargo recognition mechanism of heterotrimeric kinesin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 EMBO reports	6. 最初と最後の頁 e56864
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15252/embr.202356864	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hosaka T, Nomura T, Kubo M, Nakane T, Luo F, ... Nango E, and Shirouzu M. et al. .	4. 巻 119
2. 論文標題 Conformational alterations in unidirectional ion transport of a light-driven chloride pump revealed using X-ray free electron lasers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2117433119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 9.Murakawa T, Suzuki M, Fukui K, Masuda T, Sugahara M, Tono K, Tanaka T, Iwata S, Nango E, Yano T, Tanizawa K, and Okajima T.	4. 巻 78
2. 論文標題 Serial femtosecond X-ray crystallography of an anaerobically formed catalytic intermediate of copper amine oxidase	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section D Structural Biology	6. 最初と最後の頁 1428 ~ 1438
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2059798322010385	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Daisuke, Yonezawa Kento, Okizaki Yuki, Caaveiro Jose M. M., Ueda Tadashi, Shimada Atsushi, Sakane Fumio, Shimizu Nobutaka	4. 巻 31
2. 論文標題 Ca ²⁺ induced structural changes and intramolecular interactions in N terminal region of diacylglycerol kinase alpha	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Protein Science	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pro.4365	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yonezawa Kento, Takahashi Masatsuyo, Yatabe Keiko, Nagatani Yasuko, Shimizu Nobutaka	4. 巻 20
2. 論文標題 MOLASS: Software for automatic processing of matrix data obtained from small-angle X-ray scattering and UV-visible spectroscopy combined with size-exclusion chromatography	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Biophysics and Physicobiology	6. 最初と最後の頁 e200001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2142/biophysico.bppb-v20.0001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hosaka Toshiaki, Ehara Haruhiko, Kashiwagi Kazuhiro, Katsura Kazushige, Akasaka Ryogo, Hisano Tamao, Tanaka Tomoyuki, Tanaka Rie, Arima Toshi, Yamashita Ayumi, Sugahara Michihiro, Naitow Hisashi, Matsuura Yoshinori, Yoshizawa Susumu, Tono Kensuke, Owada Shigeki, Nureki Osamu, Kimura-Someya Tomomi, Iwata So, Nango Eriko, Shirouzu Mikako	4. 巻 119
2. 論文標題 Conformational alterations in unidirectional ion transport of a light-driven chloride pump revealed using X-ray free electron lasers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2117433119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Pan Dongqing, Oyama Ryo, Sato Tomomi, Nakane Takanori, Mizunuma Ryo, Matsuoka Keita, Joti Yasumasa, Tono Kensuke, Nango Eriko, Iwata So, Nakatsu Toru, Kato Hiroaki	4. 巻 9
2. 論文標題 Crystal structure of CmABCB1 multi-drug exporter in lipidic mesophase revealed by LCP-SFX	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IUCrJ	6. 最初と最後の頁 134 ~ 145
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052252521011611	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Murakawa Takeshi, Suzuki Mamoru, Arima Toshi, Sugahara Michihiro, Tanaka Tomoyuki, Tanaka Rie, Iwata So, Nango Eriko, Tono Kensuke, Hayashi Hideyuki, Fukui Kenji, Yano Takato, Tanizawa Katsuyuki, Okajima Toshihide	4. 巻 77
2. 論文標題 Microcrystal preparation for serial femtosecond X-ray crystallography of bacterial copper amine oxidase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section F Structural Biology Communications	6. 最初と最後の頁 356 ~ 363
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2053230X21008967	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Carrillo Melissa, Castillon Leticia, Iwata So, Nango Eriko, Tanaka Rie, Tanaka Tomoyuki, Fangjia Luo, Tono Kensuke, Owada Shigeki, Westenhoff Sebastian, Stojkovic Emina A., Schmidt Marius	4. 巻 29
2. 論文標題 High-resolution crystal structures of transient intermediates in the phytochrome photocycle	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Structure	6. 最初と最後の頁 743 ~ 754. e4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.str.2021.03.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Li Hongjie, Nakane Takanori, Yamane Takahiro, Umena Yasufumi, Suzuki Mamoru, Masuda Tetsuya, Motomura Taiki, Naitow Hisashi, Matsuura Yoshinori, Kimura Tetsunari, Tono Kensuke, Owada Shigeki, Joti Yasumasa, Tanaka Rie, Nango Eriko, Akita Fusamichi, Kubo Minoru, Iwata So, Shen Jian-Ren, Suga Michihiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Capturing structural changes of the S1 to S2 transition of photosystem II using time-resolved serial femtosecond crystallography	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IUCrJ	6. 最初と最後の頁 431 ~ 443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/s2052252521002177	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Im Dohyun, Inoue Asuka, Fujiwara Takaaki, Nakane Takanori, Yamanaka Yasuaki, Uemura Tomoko, Mori Chihiro, Shiimura Yuki, Kimura Kanako Terakado, Asada Hidetsugu, Nomura Norimichi, Tanaka Tomoyuki, Yamashita Ayumi, Nango Eriko, Tono Kensuke, Kadji Francois Marie Ngako, Aoki Junken, Iwata So, Shimamura Tatsuro	4. 巻 11
2. 論文標題 Structure of the dopamine D2 receptor in complex with the antipsychotic drug spiperone	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 6442
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-20221-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Ihara Kentaro, Hato Masakatsu, Nakane Takanori, Yamashita Keitaro, Kimura-Someya Tomomi, Hosaka Toshiaki, Ishizuka-Katsura Yoshiko, Tanaka Rie, Tanaka Tomoyuki, Sugahara Michihiro, Hirata Kunio, Yamamoto Masaki, Nureki Osamu, Tono Kensuke, Nango Eriko, Iwata So, Shirouzu Mikako	4. 巻 10
2. 論文標題 Isoprenoid-chained lipid EROCO17+4: a new matrix for membrane protein crystallization and a crystal delivery medium in serial femtosecond crystallography	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19305
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-76277-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Wickstrand Cecilia, Katona Gergely, Nakane Takanori, Nogly Przemyslaw, Standfuss Joerg, Nango Eriko, Neutze Richard	4. 巻 7
2. 論文標題 A tool for visualizing protein motions in time-resolved crystallography	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Structural Dynamics	6. 最初と最後の頁 024701 ~ 024701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5126921	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yuma Nagano, Aoi Sugiyama, Madoka Kimoto, Takuya Wakahara, Yasuyo Noguchi, Xinxin Jiang, Shinya Saijo, Nobutaka Shimizu, Nana Yabuno, Min Yao, Paul R. Gooley, Gregory W. Moseley, Takashi Tadokoro, Katsumi Maenaka, Toyoyuki Ose	4. 巻 94
2. 論文標題 The Measles Virus V Protein Binding Site to STAT2 Overlaps That of IRF9	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Virology	6. 最初と最後の頁 e01169-20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1128/JVI.01169-20	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Sachiko Toma Fukai, Ryota Hibi, Takao Naganuma, Makishito Sakai, Shinya Saijo, Nobutaka Shimizu, Michihiro Matsumoto, Toshiyuki Shimizu	4. 巻 295
2. 論文標題 2.Crystal structure of GCN5 PCAF N-terminal domain reveals atypical ubiquitin ligase structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Biological Chemistry	6. 最初と最後の頁 14630-14639
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1074/jbc.RA120.013431	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Srivastava Ashutosh, Tiwari Sandhya Premnath, Miyashita Osamu, Tama Florence	4. 巻 432
2. 論文標題 Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Studying Biomolecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Biology	6. 最初と最後の頁 2846 ~ 2860
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmb.2020.01.039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shoji Mitsuo, Abe Yukihiro, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Nishiya Yoshiaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Reaction mechanism of N-cyclopropylglycine oxidation by monomeric sarcosine oxidase	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP01679A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kaniya Nozomu, Kayanuma Megumi, Fujitani Hideaki, Shinoda Keiko	4. 巻 -
2. 論文標題 A New Lipid Force Field (FUJI)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.9b01195	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyamoto Takaaki, Hayashi Yugo, Yoshida Keito, Watanabe Hiroki, Uchihashi Takayuki, Yonezawa Kento, Shimizu Nobutaka, Kamikubo Hironari, Hirota Shun	4. 巻 8
2. 論文標題 Construction of a Quadrangular Tetramer and a Cage-Like Hexamer from Three-Helix Bundle-Linked Fusion Proteins	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Synthetic Biology	6. 最初と最後の頁 1112 ~ 1120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acssynbio.9b00019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hirata Akira, Okada Keisuke, Yoshii Kazuaki, Shiraiishi Hiroyuki, Saijo Shinya, Yonezawa Kento, Shimizu Nobutaka, Hori Hiroyuki	4. 巻 47
2. 論文標題 Structure of tRNA methyltransferase complex of Trm7 and Trm734 reveals a novel binding interface for tRNA recognition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nucleic Acids Research	6. 最初と最後の頁 10942 ~ 10955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/nar/gkz856	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ite Kenji, Yonezawa Kento, Kitanishi Kenichi, Shimizu Nobutaka, Unno Masaki	4. 巻 5
2. 論文標題 Optimal Mutant Model of Human S100A3 Protein Citrullinated at Arg51 by Peptidylarginine Deiminase Type III and Its Solution Structural Properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4032 ~ 4042
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b03618	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 James Daniel, Weinert Tobias, Skopintsev Petr, Furrer Antonia, Gashi Dardan, Tanaka Tomoyuki, Nango Eriko, Nogly Przemyslaw, Standfuss Joerg	4. 巻 -
2. 論文標題 Improving High Viscosity Extrusion of Microcrystals for Time-resolved Serial Femtosecond Crystallography at X-ray Lasers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Visualized Experiments	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3791/59087	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shimazu Yoshiaki, Tono Kensuke, Tanaka Tomoyuki, Yamanaka Yasuaki, Nakane Takanori, Mori Chihiro, Terakado Kimura Kanako, Fujiwara Takaaki, Sugahara Michihiro, Tanaka Rie, Doak R. Bruce, Shimamura Tatsuro, Iwata So, Nango Eriko, Yabashi Makina	4. 巻 52
2. 論文標題 High-viscosity sample-injection device for serial femtosecond crystallography at atmospheric pressure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Crystallography	6. 最初と最後の頁 1280 ~ 1288
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600576719012846	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Nango Eriko, Kubo Minoru, Tono Kensuke, Iwata So	4. 巻 9
2. 論文標題 Pump-Probe Time-Resolved Serial Femtosecond Crystallography at SACLA: Current Status and Data Collection Strategies	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Sciences	6. 最初と最後の頁 5505 ~ 5505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/app9245505	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計70件 (うち招待講演 47件 / うち国際学会 22件)

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによる時分割実験の現状と展望
3. 学会等名 日本農芸化学会大会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 タンパク質動的解析による反応機構解明
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Measurement systems for biomolecular movies using X-ray free electron lasers
3. 学会等名 SACLA User's Meeting 2023（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 清水 伸隆、高木秀彰、森丈晴、永谷康子、西條慎也、中村文俊、羽方望、菊池槇子、谷田部 景子、高橋 正剛、五十嵐教之
2. 発表標題 Photon FactoryのSAXSビームライン
3. 学会等名 第37回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発
3. 学会等名 令和5年度 新学術領域「高速分子動画」領域会議（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 室温下のX線結晶構造解析が見せる新たな可能性
3. 学会等名 日本結晶学会オンライン講演会第1回CrSJ Keynotes (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 Seeing is believing: X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画解析
3. 学会等名 生物物理学会若手の会夏の学校 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 3D movies of structural changes in proteins captured by X-ray free electron lasers
3. 学会等名 the 9th CWRU x Tohoku Joint Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画解析
3. 学会等名 第17回日本分子イメージング学会 総会・学術集会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発
3. 学会等名 令和5年度「高速分子動画」シンポジウム・領域会議（横浜）（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 Time-resolved serial femtosecond crystallography of microbial rhodopsins
3. 学会等名 EMBO Workshop（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清水伸隆, 菊池槿子, 高橋正剛, 谷田部景子, 永谷康子
2. 発表標題 Photon FactoryにおけるBioSAXS測定解析システム
3. 学会等名 令和5年（2023年）度日本結晶学会年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清水 伸隆、高木秀彰、森丈晴、永谷康子、西條慎也、中村文俊、羽方望、菊池槿子、谷田部 景子、高橋 正剛、五十嵐教之
2. 発表標題 Photon FactoryのSAXSビームライン
3. 学会等名 第37回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Recent activities of biology research fields and requests for facilities (tentative)
3. 学会等名 SACLA User's Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画解析
3. 学会等名 2022年度 iBIX-JAXA-KEK物構研-QST合同タンパク質研究会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 XFELによるタンパク質分子動画解析の現状と今後の展望
3. 学会等名 第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画解析
3. 学会等名 光・量子デバイス研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 3D Movies of Structural Changes in Proteins Captured by X-ray Free Electron Lasers
3. 学会等名 AsBIC10(10th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 高速分子動画計測の現状と今後の課題
3. 学会等名 新学術領域会議 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによる高時空間分解能タンパク質分子動画
3. 学会等名 第8回電子状態理論シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 高速分子動画法で観るタンパク質構造変化
3. 学会等名 第95回日本生化学会大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Time-resolved serial femtosecond crystallography of microbial rhodopsins
3. 学会等名 ICRP2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Toward understanding of enzyme reaction mechanism: serial crystallography using mixing injectors
3. 学会等名 2022 SSRL/LCLS USERS' MEETING (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 3D movies of structural changes in proteins captured by X-ray free electron lasers
3. 学会等名 Sendai2022 workshop, An Update on Molecular Machines: Open Challenges and New Perspectives (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 高速分子動画法で観るタンパク質構造変化
3. 学会等名 Agtechセミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーを用いた膜タンパク質分子動画解析
3. 学会等名 バイオインタストリー協会「発酵と代謝研究会」第1回勉強会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 百聞は一見に如かず：タンパク質分子動画から見えてくる世界
3. 学会等名 LINK-J x 東北大学次世代放射光イベント（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Time-resolved serial femtosecond crystallography of microbial rhodopsins
3. 学会等名 “ The Molecular Movies and beyond ” International Symposium 2022（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 温度ジャンプ法による分子動画解析の技術開発
3. 学会等名 新学術領域「高速分子動画」国際シンポジウム・令和4年度領域会議（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nobutaka Shimizu
2. 発表標題 Structural state estimation of biological macromolecules in solution using BioSAXS
3. 学会等名 蛋白研セミナー：Frontier of Dynamic Structural Biology（招待講演）（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nobutaka Shimizu
2. 発表標題 BioSAXS measurement and analysis system at the Photon Factory
3. 学会等名 Asia Oceania International Conference on Synchrotron Radiation Instruments 2022 (AO-SRI2022)（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 伸隆、谷田部 景子、高橋 正剛、永谷 康子
2. 発表標題 Photon FactoryのBioSAXS測定解析システムの現状
3. 学会等名 第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大和田成起
2. 発表標題 Recent developments of experimental platforms to observe the ultrafast phenomena at SACLA
3. 学会等名 International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 2022（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Tracking enzymatic reactions by mix;d-inject serial femtosecond crystallography
3. 学会等名 PACIFICHEM2021(The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画解析
3. 学会等名 日本化学会 東海コンファレンス2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 原子レベルの動的構造解析が拓く生体分子機能の理解
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会(BSJ2021) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 二液混合シリアルフェムト秒結晶構造解析による酵素反応追跡
3. 学会等名 日本結晶学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 時分割SFXにおける課題と展望
3. 学会等名 令和3年度 新学術領域「高速分子動画」シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 SACLAでの時分割構造解析
3. 学会等名 よこはまNMR研究会 第67回ワークショップ「放射光解析の最前線」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 Protein structural;dynamics revealed by molecular movie analysis
3. 学会等名 第35回アメリカ蛋白質科学会(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 高速分子動画: タンパク質の構造機能相関研究の最先端 Non-equilibrium state molecular movies: a new frontier in structural and functional studies on proteins
3. 学会等名 第21回日本蛋白質科学会年会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 高速分子動画が捉えるタンパク質構造ダイナミクス Protein structural dynamics captured by molecular movie analysis
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第77回学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによる分子動画解析
3. 学会等名 第47回生体分子科学討論会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 Time-resolved serial femtosecond crystallography of light-sensitive proteins
3. 学会等名 Belgian Crystallography Symposium BCS-11（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 Measurement Systems for Biomolecular Movies using X-ray Free Electron Lasers
3. 学会等名 SACLA Users' Meeting 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 Protein structural dynamics revealed by molecular movie analysis
3. 学会等名 RIKEN BDR Symposium 2021 “Structuring Biosystems: Functions Emerging from Molecules” (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 「高速分子動画法のこれまでとこれから」
3. 学会等名 2020年度 生物物理学会 北海道支部 - 東北支部 合同例会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南後 恵理子
2. 発表標題 高速分子動画：タンパク質が機能する際の構造変化を可視化する
3. 学会等名 第43回日本分子生物学会年会シンポジウム 拡大する構造生物学 Expanding Structural Biology (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 Protein dynamics structures revealed by time-resolved serial femtosecond crystallography
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kento Yonezawa, Masatsuyo Takahashi, Keiko Yatabe, Yasuko Nagatani, Yugo Hayashi, Shinji Amano, Hironari Kamikubo, Nobutaka Shimizu
2. 発表標題 Recent Progress of BioSAXS Equipment for Complex Molecular Systems at The Photon Factory
3. 学会等名 第20回日本タンパク質科学学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Nobutaka Shimizu, Kento Yonezawa, Masatsuyo Takahashi, Keiko Yatabe, Yasuko Nagatani
2. 発表標題 Current Status of BioSAXS at the Photon Factory
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kento Yonezawa, Ayako Furukawa, Naruhiko Adachi, Toshiya Senda, Nobutaka Shimizu, Yoshifumi Nishimura
2. 発表標題 Recent hybrid methods approach utilizing Biological Small Angle X-ray Scattering at the Photon Factory
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水伸隆、高木秀彰、永谷康子、米澤健人、大田浩正、森丈晴、谷田部景子、高橋正剛、西條慎也、鈴木文俊、羽方望、五十嵐教之
2. 発表標題 Photon Factory の散乱ビームラインの現状
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 米澤健人、古川亜矢子、安達成彦、千田俊哉、清水伸隆、西村善文
2. 発表標題 ヘテロクロマチン蛋白質(HP1)の溶液構造解析
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮下治
2. 発表標題 Hybrid Approach for Structural Biology: Simulation and Experimental Data
3. 学会等名 CBI 学会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Catalytic Reaction Mechanisms Found by using the GLAS Algorithm
3. 学会等名 ICPAC 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 酵素の反応機構解明に適した構造探索手法(GLAS)の開発
3. 学会等名 新学術領域研究「高速分子動画」キックオフミーティング・膜タンパク質研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 庄司光男, 三嶋 謙二, 堀優太, 重田育照
2. 発表標題 GLAS アルゴリズムによる酵素反応機構の新規解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Reaction mechanism of water splitting in photosystem II revealed by QM/MM calculations
3. 学会等名 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, CCS International Symposium 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 篠田恵子
2. 発表標題 多剤排出トランスポーター複合体AcrA-AcrB-AcrZ-ToICのMDシミュレーション
3. 学会等名 第14回トランスポーター研究会年会 (2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 篠田恵子
2. 発表標題 多剤排出トランスポーターAcrABZ-ToICの分子動力学シミュレーション: 膜-膜タンパク質間相互作用の評価
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Keiko Shinoda
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Multidrug Efflux Transporter AcrA-AcrB-AcrA-ToIC Complex Embedded in Lipid Bilayer
3. 学会等名 64th Annual Meeting of the Biophysical Society
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水伸隆
2. 発表標題 SEC-SAXS による分子間相互作用測定解析システム
3. 学会等名 第33回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shimizu, Nobutaka; Yonezawa, Kento; Takahashi, Masatuyo; Yatabe, Keiko, Nagatani, Yasuko
2. 発表標題 BioSAXS experiment at the Photon Factory
3. 学会等名 International Symposium on Diffraction Structural Biology 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Nobutaka Shimizu, Kento Yonezawa, Masatsuyo Takahashi, Keiko Yatabe, Yasuko Nagatani
2. 発表標題 Progress of Biological Small-Angle X-ray Scattering at the Photon Factory
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 タンパク質が起こす反応を原子レベルで追跡する～X線自由電子レーザーによる分子動画撮影～
3. 学会等名 新規素材探索研究会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 A molecular movie of structural changes in the light-driven proton pump bacteriorhodopsin,
3. 学会等名 2019 ESP-IUPB World Congress（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるロドプシン類の分子動画解析
3. 学会等名 ISSP ワークショップ「レチナルタンパク質の光機能発現の物理と化学（招待講演）」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 南後恵理子
2. 発表標題 X線自由電子レーザーによるタンパク質分子動画撮影
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Eriko Nango
2. 発表標題 Time-resolved serial femtosecond crystallography at SACLA: Current status and future prospects
3. 学会等名 MicroMax User Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 庄司光男	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Amazon Kindle direct publishing (電子書籍)	5. 総ページ数 70
3. 書名 Gaussian16で始める量子化学超入門	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	清水 伸隆 (Shimizu Nobutaka) (20450934)	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・教授 (82118)	
研究分担者	大和田 成起 (Owada Shigeki) (90725962)	公益財団法人高輝度光科学研究センター・XFEL利用研究推進室・主幹研究員 (84502)	
研究分担者	宮下 治 (Miyashita Osamu) (10620528)	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・上級研究員 (82401)	初年度のみ

6. 研究組織 (つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	庄司 光男 (Shoji Mitsuo) (00593550)	筑波大学・計算科学研究センター・助教 (12102)	初年度のみ
研究分担者	篠田 恵子 (Shinoda Keiko) (80646951)	東京大学・先端科学技術研究センター・特任助教 (12601)	初年度のみ

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	登野 健介 (Tono Kensuke)		
研究協力者	城地 保昌 (Joti Yasumasa)		
研究協力者	中根 崇智 (Nakane Takanori)		
研究協力者	鈴木 守 (Suzuki Mamoru)		
研究協力者	榑田 哲哉 (Masuda Tetsuya)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	上久保 裕生 (Kamikubo Hironari)		
研究協力者	池口 満徳 (Ikeguchi Mitsunori)		
研究協力者	藤原 孝彰 (Fujiwara Takaaki)		
研究協力者	足立 伸一 (Adachi Shin-ichi)		
研究協力者	片山 哲夫 (Katayama Tetsuo)		
研究協力者	野澤 俊介 (Nozawa Shunsuke)		
研究協力者	姜 正敏 (Kang Jungmin)		
研究協力者	田口 真彦 (Taguchi Masahiko)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------