

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 13 日現在

機関番号：82401

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H05453

研究課題名（和文）分子シミュレーションによるタンパク質化学反応ダイナミクスの解明

研究課題名（英文）Unraveling Protein Chemical Reaction Dynamics through Molecular Simulations

研究代表者

宮下 治（Miyashita, Osamu）

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

研究者番号：10620528

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 65,410,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、量子古典混合計算による化学反応解析や高精度力場を用いた大規模長時間シミュレーション、実験データとシミュレーションを融合させるハイブリッドアプローチなどの多角的な理論・計算研究アプローチを用い、構造変化を原子分解能で捉える高速分子動画法による実験データも融合活用しながら、化学反応に伴うタンパク質の動的構造変化とその化学反応機構を解き明かす研究を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高速分子動画法を用いた実験データと、量子古典混合計算や分子動力学シミュレーションなどの理論・計算手法を組み合わせることで、タンパク質の動的挙動や反応メカニズムを詳細に解析することが可能になった。このような融合的手法は化学や生物物理学などの学術分野においての基礎理論の発展に貢献する。また、タンパク質の動的構造変化や化学反応機構を解き明かすことは、疾患の原因究明や新しい医薬品の開発、既存薬品の改良につながるものである。

研究成果の概要（英文）：In this study, we used a variety of theoretical and computational methods to elucidate the dynamic conformational changes of proteins and their chemical reaction mechanisms. Our approaches included chemical reaction analysis using QM/MM (quantum mechanics/molecular mechanics) calculations, large-scale long-time simulations with highly accurate force fields, and hybrid techniques that integrate experimental data with simulations. By incorporating data from molecular movie experiments, which capture structural changes at atomic resolution, we have gained a better understanding of these processes.

研究分野：計算構造生物学

キーワード：タンパク質 脂質膜 分子動力学シミュレーション 量子古典混合計算 モデリング 化学反応解析
動的構造解析 電子状態

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

タンパク質の機能発現メカニズムを解明するためには、反応に伴う構造変化や電子状態の詳細な情報が必要である。X線自由電子レーザー (XFEL) による時分割結晶構造解析 (TR-SFX) は、タンパク質の構造変化を観測する新しい手法であるが、スナップショットの数や解像度に限りがあるため、タンパク質の連続的な時間発展を詳細に解析することは難しく、電子状態に関する詳細な情報を得ることも困難である。したがって、様々な研究手法を融合的に活用することが必要であり、TR-SFX や分光測定による実験データを理論解析や計算機シミュレーションと連携させることが重要な課題となっていた。

2. 研究の目的

TR-SFX により、数十フェムト秒からミリ秒までの構造変化を原子レベルの分解能で観測することができる。このスケールは生体高分子のシミュレーションと一致するため、計算と実験を組み合わせることで反応に関する詳細な情報を得ることが可能である。本研究では、量子古典混合計算、高精度力場を用いた大規模シミュレーション、実験データとシミュレーションを融合させるハイブリッドアプローチなどの方法を用いることで、高速分子動画のデータを活用しながら、タンパク質の動的構造変化と化学反応機構を解明することを目的とした。

(1) 計算機シミュレーションを用いることで XFEL による時分割データからタンパク質の反応に伴う構造変化の詳細を得るハイブリッドモデリングアプローチを開発する。特に、TR-SFX のデータを融合させた分子動力学シミュレーションを用いることで構造の時間発展のモデリングを自動的かつ高精度に行う手法を開発する。また、XFEL によって得られる単粒子構造観測データから動的構造を得るためのデータ処理パイプラインやモデリング手法を開発する。

(2) SFX で捕らえた反応中間体構造群に対し、量子古典混合計算 (QM/MM) を実施し、より詳細な電子状態変化及び安定性を解析することで、動的構造変化機構及び化学反応の真理を解き明かす。集光アンテナタンパク質フィコシアニンにおける高速エネルギー移動、バクテリオロドプシンの光反応過程、銅含有アミン酸化酵素の触媒反応サイクル過程に対し、QM/MM でより詳細な分子機構を解明する。

(3) 既存の力場がない脂質分子の力場を開発し、実際の環境に近い所望の膜タンパク質系を構築する。その系に対して、SFX 実験や輸送機能アッセイ、そして長時間 MD シミュレーションを組み合わせることで、より実際の環境に近い膜タンパク質の原子レベルの動態に関する新たな知見を得る。

3. 研究の方法

(1) XFEL による TR-SFX データから構造変化の情報を得るため、実験データを入力として活用するデータ融合シミュレーションのアルゴリズムとツールを開発する。また、XFEL の単粒子観測データを解析し、3次元構造情報を得るためのアルゴリズムとツールを開発する。そして、これらの技術を実験データに応用する。

(2) QM/MM 法を用いて酵素反応解析を実施する。酵素活性中心は量子力学計算手法 (QM) で取り扱い、そのほかのタンパク質および溶媒水分子は古典力学法 (MM) で取り扱う。構造解析では決定しきれない水素原子や水分子について理論的に補完および検証し、反応中間体構造や遷移状態構造およびエネルギー変化を理論的に明確にする。

(3) 古細菌膜を含むさまざまな膜の脂質分子に対する高精度な力場パラメータセットを開発した。またこれらの脂質分子を用いて所望の膜を構築し、実際の環境に近い膜タンパク質系モデルを作成した。これらの膜タンパク質系モデルを用いて長時間の分子動力学 (MD) シミュレーションを実施した。

4. 研究成果

(1) XFEL による観測データから対象分子の構造や運動に関する情報を得るためのデータ解析手法および計算機シミュレーションを融合するモデリング手法を開発し、実験データに応用した。

① XFEL による TR-SFX 実験では、結晶状態にあるタンパク質の化学反応をレーザー光などで同期的に開始し、特定の時間後の構造状態を X 線で観測する。このとき、結晶内には反応を起こしているタンパク質と起こしていないタンパク質が混在しているため、データ解析が複雑になる。そこで、反応前後の X 線散乱画像を比較して得られる分子電子密度差マップと、分子動力学シミュレーションで得られる反応後の構造が一致するように擬似的な力を加える構造モデリングアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムをロドプシンなどの実験データに応用し、構造変化のモデルを導き出せることを確認した。これにより、従来は熟練者による作業が必要だったモデリングを自動化することが可能となる。また、分子電子密度差マップを解析し、反応に伴う構造変化を起こしているタンパク質残基を可視化することで、データ解析を支援するツールも開発した。

② 上記の手法で利用する電子密度差マップの作成そのものには解析上の近似が含まれる。また TR-SFX の実験では結晶形が大きく変わり、差マップの作成ができない観測対象も存在する。そこで、分子動力学シミュレーションによる構造サンプリングを活用し、実験で得られる時間スナップショットの散乱データそのものから反応前後の混ざった構造を直接推定する方法を開発した。

③ XFEL による構造解析手法の一つである結晶状態ではない分子複合体を強力な X で観測する単粒子解析について、理論と応用の面から研究を進めた。多数の XFEL 散乱画像からそれぞれの対象分子の観測方位を推定し、3次元構造情報を得るためのアルゴリズムとソフトウェアの開発をした。これを実験データに応用するにあたり、得られている多数の画像データからシグナルを含む画像の抽出を行うためのパイプラインの整備や、データに含まれるノイズを除去することにより得られる構造情報の解像度を上げる手法を開発し、SACLA における初めての XFEL 単粒子解析に成功した。

④ XFEL による単粒子観測ではその強力な X 線を活用することで時分割実験が可能になると考えられる。しかし単粒子の時分割散乱データから対象分子の立体構造を直接得ることは原理的に難しい。そこでシミュレーションを活用することで画像データ 1 枚から観測対象分子の構造変化を推定する方法を開発した。

⑤ TR-SFX によるタンパク質の動的構造解析では、タンパク質が結晶環境にある影響を考慮する必要があり、これが実験結果から機能発現メカニズムを議論する際に問題となることが多い。結晶内の運動に関する具体的な情報をシミュレーションで得ることで、推定に依存せず議論を明確にするため、結晶状態のタンパク質群の運動を解析する分子動力学シミュレーション手法を開発した。

(2) 無損傷高分解能結晶構造解析および時分割構造解析 (SFX) により明らかになった知見をもとに、酵素反応過程をより詳細かつ正確に理論解明を行うことで、さまざまな観測対象について

複雑な構造変化および反応素過程を明らかにした (図1)。

① 銅含有アミン酸化酵素 (CAO) は、活性中心にトパキノン (TPQ) 補酵素と銅イオンを保持しており、特異的活性を発現している。バクテリアの CAO (AGAO) ではセミキノンラジカル中間体を生成していることが示唆されていたが、生成経路や生成理由、変異体実験結果の解釈が難しかった。新学術領域「高速分子動画」の村川武志先生が得た混合注入 SFX 結果を基に、セミキノンラジカル生成の反応経路とエネルギー変化、および変異体実験について QM/MM を用いた理論解析を実施した。これにより、セミキノンラジカル生成の意義を明確にし、AGAO の優れた酵素反応戦略について明らかにすることができた。さらに、セミキノンラジカル状態でのプロトン化状態や UV スペクトル帰属も実験結果と対応させて詳細に解明した。これまで酵素は活性中心の構造変化をほとんど起こさないのが通説であったが (鍵と鍵穴説や誘導適合説)、AGAO では構造変化を触媒反応で活用しており、構造変化が酵素反応にとって有用であることを明らかにした。

② 光合成集光アンテナ蛋白質 c-ピコシアニン集合体における励起エネルギー移動速度について理論解析を実施した。色素分子の多量体モデルを用いて、励起エネルギー移動と構造変化について理論解析を進めた。本新学術領域の梅名泰史先生が得た高分解能結晶構造と比較し、効率的エネルギー移動について議論した。

③ ヘモグロビン (Hb) では、ラマン分光で帰属が不十分であった振動モードを理論的に帰属し、活性中心アミノ酸の構造変化とラマン振動周波数の相関について、筑波大学長友成紀先生と共に理論解析し、活性中心構造を予測した。本新学術領域の朴三用先生および自治医科大柴山修哉先生らにより複数の変異体種で構造解析することが成功し、理論予測と比較したところ、構造特徴が極めて良い一致を示していることが判明した。

④ 光応答タンパク質であるヘリオロドプシンについて、構造変化を誘起する亜鉛結合について、新学術領域の神取秀樹先生、片山耕大先生らの赤外分光 (FTIR) 結果を元に、分子動力学 (MD) 計算を用いて構造予測を行った。また、Ca²⁺イオン結合に対する構造変化についても、構造変化予測を行い、ヘリックスの構造変化と水素結合ネットワーク変化について解析した。

⑤ 反応解析に使っていた反応経路探索手法 (GLAS) を改良し、異性体探索を実施することで、アミノ酸及びアミノ酸前駆体の安定な構造異性体を求めることができることを示した。計算結果に基づき、宇宙生命研究において重要となるキラルアミノ酸の生成起源について理論的に考察した。

⑥ リゾチームに固定化した MnCO₃ 錯体の光分解反応が、本新学術領域の Maity Basudev 先生、上野隆史先生および南後恵理子先生らにより SFX 撮影された。実験で捉えられた構造変化だけでなく、すべての副反応経路について QM/MM 法により理論解析し、SFX 経路の主反応特性を明らかにした。本研究はタンパク質結晶を使った金属錯体の時分割反応解析応用として、極めて重要であると考えられる。

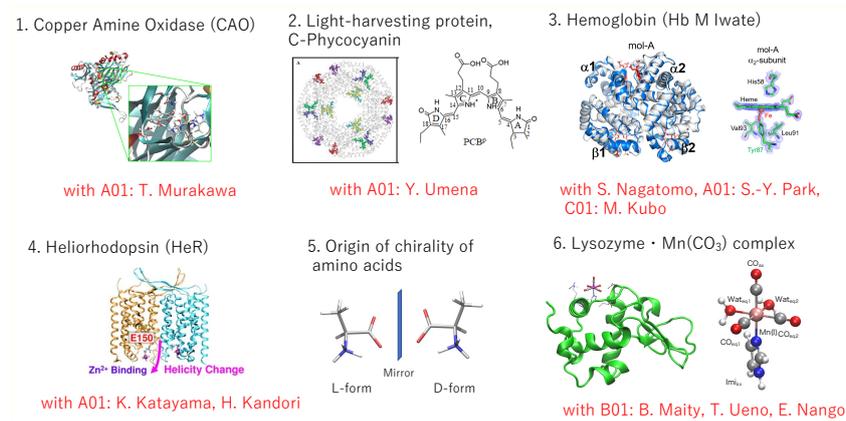


図 1: 実施研究課題一覧。赤字で共同研究者名を記載。

(3) 実際の環境に近い所望の膜タンパク質系を構築するために、既存の力場のない脂質分子の力場および実験データに基づく膜の脂質組成予測手法を開発し、バクテリオロドプシンをはじめとした様々な膜タンパク質の MD シミュレーションを実施した。

①新たな脂質分子の力場開発とオーダーメイドな膜の構築をおこなった。バクテリオロドプシンが存在する高度好塩菌膜で多数を占める分岐鎖エーテル型脂質や結晶構造で観測された直鎖脂肪酸を模倣した直鎖エーテル型脂質の力場開発を行なった。古細菌脂質分子は他の生物とは異なり、L-glycerol 結合を持つ。この L 型のグリセロ骨格部分に対応する力場パラメータは fuji 力場を含め既存力場には存在しなかったため、新しく古細菌膜脂質分子の力場パラメータセットを開発した。また同様に、大腸菌膜に必須のカルジオリピンや、脂質膜合成や ABC トランスポータの基質として重要な Lipid-A において、fuji 力場用の bending パラメータと torsion パラメータを開発した。これらのパラメータは多くの脂質分子に共通して存在しなかったため、開発によって新たに 9 分子の力場パラメータセットを作成することができた。この中には原子数 352 原子の大きなリポ多糖 (LPS) も含まれる。次に質量分析法よりも簡便でコストのかからない脂肪酸測定によって得られた膜の脂肪酸比から、微生物の細胞膜を構成する脂質分子を予測し膜を構築する手法を開発した。これにより大腸菌 W3110S 膜、大腸菌 Δ CFA 膜を構築した。その他、領域研究期間に古細菌膜、乳酸菌膜、人工リポソーム膜、植物モデル膜、ヒトモデル膜、グラム陽性菌モデル膜を構築した。

②バクテリオロドプシンの長時間 MD シミュレーションを行った。特に、光励起前構造と K 状態 (励起後 16 ナノ秒および 760 ナノ秒) および L 状態 (励起後 2 マイクロ秒および 36.2 マイクロ秒) の構造を初期構造とした MD シミュレーションを実施し解析した。レチナル分子周囲の水の分布を調査した結果、励起後 16 ナノ秒のシミュレーションにおいて、実験の結晶構造では捕らえられていない水の分布が見出され、その位置は L 状態の構造で見られるものに近いことが判明した。また、水分子は同じ位置に束縛されるタイプと、他の水分子と頻繁に入れ替わるタイプが存在し、レチナルとその周辺に位置する Asp85 や Asp212 との相互作用の大きさにこれらの水分子が関与することが示唆された。

さらに、古細菌膜と生体モデル膜 (POPE) におけるバクテリオロドプシンとの相互作用の違いを解析した結果、三量体であるバクテリオロドプシンは、POPE 膜とより強く相互作用することが明らかとなった。バクテリオロドプシンのモノマー・モノマー界面に位置するアミノ酸と POPE 膜は相互作用していたが、古細菌膜では相互作用がほとんどないことがわかった。この差異は、脂質分子のグリセロ骨格部分の構造の違いに起因することが示唆された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計32件（うち査読付論文 32件 / うち国際共著 15件 / うちオープンアクセス 18件）

1. 著者名 Zhao Wenyang, Miyashita Osamu, Nakano Miki, Tama Florence	4. 巻 11
2. 論文標題 Structure determination using high-order spatial correlations in single-particle X-ray scattering	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 IUCrJ	6. 最初と最後の頁 92 ~ 108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052252523009831	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 Miyashita Osamu, Tama Florence	4. 巻 82
2. 論文標題 Advancing cryo-electron microscopy data analysis through accelerated simulation-based flexible fitting approaches	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Current Opinion in Structural Biology	6. 最初と最後の頁 102653 ~ 102653
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.sbi.2023.102653	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 Vuillemot Remi, Mirzaei Alex, Harastani Mohamad, Hamitouche Ilyes, Frechin Leo, Klaholz Bruno P., Miyashita Osamu, Tama Florence, Rouiller Isabelle, Jonic Slavica	4. 巻 435
2. 論文標題 MDSPACE: Extracting Continuous Conformational Landscapes from Cryo-EM Single Particle Datasets Using 3D-to-2D Flexible Fitting based on Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Biology	6. 最初と最後の頁 167951 ~ 167951
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmb.2023.167951	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 Watanabe Natsuki, Horii Yuta, Shoji Mitsuo, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru	4. 巻 35
2. 論文標題 Organocatalytic racemization reaction elucidation of aspartic acid by density functional theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chirality	6. 最初と最後の頁 645 ~ 651
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chir.23573	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 Watanabe Natsuki, Shoji Mitsuo, Miyagawa Koichi, Hori Yuta, Boero Mauro, Umemura Masayuki, Shigeta Yasuteru	4. 巻 25
2. 論文標題 Enantioselective amino acid interactions in solution	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 15023 ~ 15029
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP00278K	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 Sato Akimasa, Shoji Mitsuo, Watanabe Natsuki, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Umemura Masayuki	4. 巻 23
2. 論文標題 Origin of Homochirality in Amino Acids Induced by Lyman- Irradiation in the Early Stage of the Milky Way	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Astrobiology	6. 最初と最後の頁 1019 ~ 1026
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1089/ast.2022.0140	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 Murakawa Takeshi, Kurihara Kazuo, Shoji Mitsuo, Yano Naomine, Kusaka Katsuhiko, Kawano Yoshiaki, Suzuki Mamoru, Shigeta Yasuteru, Yano Takato, Adachi Motoyasu, Tanizawa Katsuyuki, Okajima Toshihide	4. 巻 13
2. 論文標題 Neutron Crystallography of a Semiquinone Radical Intermediate of Copper Amine Oxidase Reveals a Substrate-Assisted Conformational Change of the Peptidyl Quinone Cofactor	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 12403 ~ 12413
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.3c02629	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 Kumagai Yugo, Takabe Risa, Nakazono Takashi, Shoji Mitsuo, Isobe Hiroshi, Yamaguchi Kizashi, Misawa-Suzuki Tomoyo, Nagao Hirotaka, Wada Tohru	4. 巻 8
2. 論文標題 Water oxidation utilizing a ruthenium complex featuring a phenolic moiety inspired by the oxygen-evolving centre (OEC) of photosystem II	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Sustainable Energy & Fuels	6. 最初と最後の頁 905 ~ 913
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3se01610b	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 Kinose Keita, Shinoda Keiko, Konishi Tomoyuki, Kawasaki Hisashi	4. 巻 108:251
2. 論文標題 Mutational analysis in <i>Corynebacterium stationis</i> MFS transporters for improving nucleotide bioproduction	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Applied Microbiology and Biotechnology	6. 最初と最後の頁 1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00253-024-13080-y	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, Kitazawa Yuya, Sato Akimasa, Watanabe Natsuki, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Umemura Masayuki	4. 巻 14
2. 論文標題 Enantiomeric Excesses of Aminonitrile Precursors Determine the Homochirality of Amino Acids	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 3243 ~ 3248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.2c03862	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 Mishima Kenji, Shoji Mitsuo, Umena Yasufumi, Shigeta Yasuteru	4. 巻 96
2. 論文標題 Biological Advantage of the Arrangements of C-Phycocyanin Chromophores in Phycobilisome from the Electronic Energy Transfer Viewpoint	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 381 ~ 393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20220334	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, Murakawa Takeshi, Nakanishi Shota, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Hayashi Hideyuki, Okajima Toshihide	4. 巻 13
2. 論文標題 Molecular mechanism of a large conformational change of the quinone cofactor in the semiquinone intermediate of bacterial copper amine oxidase	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 10923 ~ 10938
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2SC01356H	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 Shoji Mitsuo, Watanabe Natsuki, Hori Yuta, Furuya Kenji, Umemura Masayuki, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru	4. 巻 22
2. 論文標題 Comprehensive Search of Stable Isomers of Alanine and Alanine Precursors in Prebiotic Syntheses	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Astrobiology	6. 最初と最後の頁 1129 ~ 1142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1089/ast.2022.0011	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 Hashimoto Masanori, Miyagawa Koichi, Singh Manish, Katayama Kota, Shoji Mitsuo, Furutani Yuji, Shigeta Yasuteru, Kandori Hideki	4. 巻 25
2. 論文標題 Specific zinc binding to heliorhodopsin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3535 ~ 3543
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP04718G	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 Nagatomo Shigenori, Shoji Mitsuo, Terada Takuto, Nakatani Kiyoharu, Shigeta Yasuteru, Hirota Shun, Yanagisawa Sachiko, Kubo Minoru, Kitagawa Teizo, Nagai Masako, Ohki Mio, Park Sam-Yong, Shibayama Naoya	4. 巻 121
2. 論文標題 Heme-bound tyrosine vibrations in hemoglobin M: Resonance Raman, crystallography, and DFT calculation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Biophysical Journal	6. 最初と最後の頁 2767 ~ 2780
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bpj.2022.06.012	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 Nakano Miki, Miyashita Osamu, Tama Florence	4. 巻 10
2. 論文標題 Molecular size dependence on achievable resolution from XFEL single-particle 3D reconstruction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Structural Dynamics	6. 最初と最後の頁 1 ~ 16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/4.0000175	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 Nakano Miki, Miyashita Osamu, Joti Yasumasa, Suzuki Akihiro, Mitomo Hideyuki, Niida Yoshiya, Yang Ying, Yumoto Hirokatsu, Koyama Takahisa, Tono Kensuke, Ohashi Haruhiko, Yabashi Makina, Ishikawa Tetsuya, Bessho Yoshitaka, Ijiri Kuniharu, Nishino Yoshinori, Tama Florence	4. 巻 9
2. 論文標題 Three-dimensional structure determination of gold nanotriangles in solution using X-ray free-electron laser single-particle analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Optica	6. 最初と最後の頁 776 ~ 784
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OPTICA.457352	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 Nakata Kunio, Miyazaki Naoyuki, Yamaguchi Hiroki, Hirose Mika, Kashiwagi Tatsuki, Kutumbarao Nidamarthi H.V., Miyashita Osamu, Tama Florence, Miyano Hiroshi, Mizukoshi Toshimi, Iwasaki Kenji	4. 巻 214
2. 論文標題 High-resolution structure of phosphoketolase from Bifidobacterium longum determined by cryo-EM single-particle analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Structural Biology	6. 最初と最後の頁 107842 ~ 107842
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jsb.2022.107842	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 Vuillemot Remi, Miyashita Osamu, Tama Florence, Rouiller Isabelle, Jonic Slavica	4. 巻 434
2. 論文標題 NMMD: Efficient Cryo-EM Flexible Fitting Based on Simultaneous Normal Mode and Molecular Dynamics atomic displacements	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Biology	6. 最初と最後の頁 167483 ~ 167483
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmb.2022.167483	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 Asi Han, Dasgupta Bhaskar, Nagai Tetsuro, Miyashita Osamu, Tama Florence	4. 巻 9
2. 論文標題 A hybrid approach to study large conformational transitions of biomolecules from single particle XFEL diffraction data	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Frontiers in Molecular Biosciences	6. 最初と最後の頁 1 ~ 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fmolb.2022.913860	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 Olaya Paula, Caino-Lores Silvina, Lama Vanessa, Patel Ria, Rorabaugh Ariel Keller, Miyashita Osamu, Tama Florence, Taufer Michela	4. 巻 -
2. 論文標題 Identifying Structural Properties of Proteins from X-ray Free Electron Laser Diffraction Patterns	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 2022 IEEE 18th International Conference on e-Science (e-Science)	6. 最初と最後の頁 21-31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/eScience55777.2022.00017	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 Tiwari Sandhya P., Tama Florence, Miyashita Osamu	4. 巻 61
2. 論文標題 Protocol for Retrieving Three-Dimensional Biological Shapes for a Few XFEL Single-Particle Diffraction Patterns	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 4108 ~ 4119
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.1c00602	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 Dasgupta Bhaskar, Miyashita Osamu, Uchihashi Takayuki, Tama Florence	4. 巻 8
2. 論文標題 Reconstruction of Three-Dimensional Conformations of Bacterial ClpB from High-Speed Atomic-Force-Microscopy Images	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Frontiers in Molecular Biosciences	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) 10.3389/fmolb.2021.704274	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 Mishima Kenji, Shoji Mitsuo, Umena Yasufumi, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru	4. 巻 18
2. 論文標題 Estimation of the relative contributions to the electronic energy transfer rates based on Foerster theory: The case of C-phyco cyanin chromophores	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biophysics and Physicobiology	6. 最初と最後の頁 196 ~ 214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2142/biophysico.bppb-v18.021	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 Shinoda Keiko, Yokojima Satoshi, Fukaminato Tuyoshi, Nakamura Shinichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Determining Factor of the Quantum Yield of the Cyclization Reaction via Triplet States for Dye-Attached Diarylethene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 5895 ~ 5902
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c02912	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 Raturi Sagar, Nair Asha V., Shinoda Keiko, Singh Himansha, Bai Boyan, Murakami Satoshi, Fujitani Hideaki, van Veen Hendrik W.	4. 巻 4
2. 論文標題 Engineered MATE multidrug transporters reveal two functionally distinct ion-coupling pathways in NorM from <i>Vibrio cholerae</i>	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Biology	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) 10.1038/s42003-021-02081-6	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 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 Yamasaki Sotaro, Shoji Mitsuo, Kayanuma Megumi, Sladek Vladimir, Inaoka Daniel Ken, Matsuo Yuichi, Shiba Tomoo, Young Luke, Moore Anthony L., Kita Kiyoshi, Shigeta Yasuteru	4. 巻 1862
2. 論文標題 Weak O ₂ binding and strong H ₂ O ₂ binding at the non-heme diiron center of trypanosome alternative oxidase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics	6. 最初と最後の頁 148356 ~ 148356
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbabi.2020.148356	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 Shoji Mitsuo, Murakawa Takeshi, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Hayashi Hideyuki, Okajima Toshihide	4. 巻 10
2. 論文標題 Unique protonation states of aspartate and topaquinone in the active site of copper amine oxidase	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 38631 ~ 38639
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA06365G	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 Mishima Kenji, Shoji Mitsuo, Umena Yasufumi, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru	4. 巻 93
2. 論文標題 Role of the Propionic Acid Side-Chain of C-Phycocyanin Chromophores in the Excited States for the Photosynthesis Process	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1509 ~ 1519
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20200187	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 Shoji Mitsuo, Abe Yukihiro, Boero Mauro, Shigeta Yasuteru, Nishiya Yoshiaki	4. 巻 22
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 16552 ~ 16561
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 Kamiya Nozomu, Kayanuma Megumi, Fujitani Hideaki, Shinoda Keiko	4. 巻 16
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 3664 ~ 3676
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 -

[学会発表] 計67件(うち招待講演 30件/うち国際学会 23件)

1. 発表者名 Osamu Miyashita
2. 発表標題 Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology
3. 学会等名 Workshop on "Program for Promoting Researches on the Supercomputer Fugaku" (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Osamu Miyashita
2. 発表標題 Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology
3. 学会等名 "Molecular Movies" International Symposium 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Osamu Miyashita
2. 発表標題 Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology
3. 学会等名 Multi-scale Molecular Dynamics Simulation and Machine Learning of Biomolecular Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮下治
2. 発表標題 構造生物学へのハイブリッドアプローチ: シミュレーションと実験データの融合
3. 学会等名 日本蛋白質科学会大会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 量子化学計算を活用した複雑酵素反応および生体分子ホモキラリティ機構の解明
3. 学会等名 量子生命科学会第5回大会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Quantum chemistry study of the origin of homochirality of amino acids
3. 学会等名 CJK-WTCC（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 The reaction mechanism of bacterial copper amine oxidase: interplay of theoretical QM/MM calculations and experimental methods
3. 学会等名 CJK-WTCC（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Origin of homochirality of amino acids
3. 学会等名 ICPAC Bali 2023（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 QM/MM study of the reaction mechanism of sesamin biosynthesis by cytochrome P450
3. 学会等名 ICCP450-JSSS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M.Shoji, M.Takeshi, Y.Hori, Y.Shigeta, H.Hayashi, T.Okajima
2. 発表標題 QM/MM Free energy simulation for the catalytic reaction of bacterial copper amine oxidase
3. 学会等名 The 61st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 篠田 恵子
2. 発表標題 MFSトランスポーターの高活性変異と基質排出機構
3. 学会等名 高速分子動画シンポジウム2023 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 篠田 恵子
2. 発表標題 膜タンパク質の分子動力学シミュレーション：膜のタンパク質へ与える影響
3. 学会等名 生命システム原材料研究会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Keiko Shinoda and Hisashi Kawasaki
2. 発表標題 Molecular dynamics study of multidrug efflux transporter complex embedded in lipid bilayer: Role of membrane lipids in the transporter
3. 学会等名 第60回日本生物物理学会（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 川崎寿、篠田恵子、濱本晋
2. 発表標題 分子シミュレーションを利用した膜蛋白質デザイン
3. 学会等名 バイオインダストリー協会「発酵と代謝研究会」講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 黄瀬啓太、小西智之、篠田恵子、川崎寿
2. 発表標題 Corynebacterium stationisの変異型MFSトランスポーターによるIMPの分泌型発酵生産
3. 学会等名 日本農芸化学会2023年度大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Theoretical insights into the molecular mechanisms of dynamical biochemical reactions
3. 学会等名 Molecular Movies International Symposium 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男、宮川晃一、三嶋謙二、堀優太、重田育照
2. 発表標題 光合成水分解酸素発生におけるMnの自然選択の理由
3. 学会等名 量子生命科学会第4回大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 銅含有アミン酸化酵素におけるトパキノン補酵素の構造変化機構
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 GLASアルゴリズムによる酵素反応機構の理論解明：新規反応経路探索手法の開発と適用
3. 学会等名 物性研短期研究会「理論タンパク質物性科学の最前線：理論と実験との密な協働」（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Natural selection of the Mn cluster in the photosynthetic water oxidation
3. 学会等名 Satellite Meeting to 18th International Congress on Photosynthesis Research (WOX-ICPR2022)（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 QM/MM-MD study of the role of valine 185 in the oxygen-evolving complex of photosystem II
3. 学会等名 60th Annual Meeting of BSJ (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 アミノ酸ホモキラリティ起源についての電子状態探査
3. 学会等名 計算アストロバイオロジー2022 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 酵素反応における構造変化の重要性
3. 学会等名 令和4年度新学術領域研究「高速分子動画」シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 A Large Conformational Change of the Quinone Cofactor in Bacterial Copper Amine Oxidase
3. 学会等名 ICPAC Kota Kinabalu 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 酵素反応のQM/MM解析
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ2022「複雑電子状態の理論・計算科学」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Unique reaction mechanism of copper amine oxidase revealed by theoretical QM/MM and experimental approaches
3. 学会等名 CCS-KISTI workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Srinivasa Raghavan Sriram, Miyashita Osamu, Tama Florence
2. 発表標題 Automated Density Extraction of Isomorphous Difference Map and Occupancy-estimation for Conformer Fitting
3. 学会等名 The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮下治
2. 発表標題 構造生物学へのハイブリッドアプローチ: シミュレーションと実験データの融合
3. 学会等名 物性研短期研究会: 理論と実験との密な協働 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮下治
2. 発表標題 構造生物学へのハイブリッドアプローチ: シミュレーションと実験データの融合
3. 学会等名 The 95th Annual Meeting of the Japanese Biochemical Society (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Zhao Wenyang, Miyashita Osamu, Tama Florence
2. 発表標題 3D structural determination of proteins from fluctuation X-ray scattering data
3. 学会等名 The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Srinivasa Raghavan Sriram, Miyashita Osamu, Tama Florence
2. 発表標題 Automated Density Extraction of Isomorphous Difference Map and Occupancy-estimation for Conformer Fitting
3. 学会等名 Molecular Movies International Symposium 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Srinivasa Raghavan Sriram, Miyashita Osamu, Tama Florence
2. 発表標題 Automated Density Extraction of Isomorphous Difference map and Occupancy-estimation for Conformer Fitting
3. 学会等名 令和4年度新学術領域研究「高速分子動画」シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nakano Miki, Miyashita Osamu, Tama Florence
2. 発表標題 Molecular size effect on the single-particle analysis using X-ray free electron laser
3. 学会等名 The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中野 美紀、宮下 治、Tama Florence
2. 発表標題 XFELを用いた単粒子解析で復元された 分子構造の解像度における分子サイズの影響
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 中野美紀, 宮下治, 城地保昌, 鈴木明大, 西野吉則, and Tama Florence
2. 発表標題 X線自由電子レーザー単粒子解析を使用した溶液中の金ナノ粒子の三次元構造決定
3. 学会等名 第35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 2022年

1. 発表者名 Miki Nakano, Osamu Miyashita, and Florence Tama
2. 発表標題 Molecular size effect on the single-particle 3D structure reconstruction analysis using X-ray free electron laser
3. 学会等名 The 4th R-CCS International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Osamu Miyashita, Bhaskar Dasgupta, and Florence Tama
2. 発表標題 Reconstruction algorithm of low-resolution three-dimensional conformations of biomolecules from atomic force microscopy images
3. 学会等名 ACS Spring 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英
2. 発表標題 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノラジカル生成機構についての理論的解明
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英
2. 発表標題 銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についてのQM/MM解析
3. 学会等名 第47回生体分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英
2. 発表標題 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノラジカル生成機構の理論解明
3. 学会等名 量子生命科学会第3回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三嶋謙二, 梅名泰史, Mauro Boero, 重田育照, 庄司光男
2. 発表標題 線形型フェルスター理論を用いた, フィコシアノピリンの電子励起エネルギー移動に関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮川晃一, 川上貴資, 庄司光男, 磯部寛, 山口兆, 重田育照
2. 発表標題 光化学系IIにおける酸素発生中心のS1状態での中間体構造の電子状態のDFTとCC法による解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 庄司光男, 三嶋謙二, 宮川晃一, 堀優太, 重田育照
2. 発表標題 GLAS 法による分子構造及び化学反応経路の探索
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三嶋謙二, 庄司光男, M. Boero, 重田育照
2. 発表標題 電子エネルギー移動における光合成 C-フィコシアニン生物学的起源の一考察
3. 学会等名 量子生命科学先端フォーラム2021冬の研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮川晃一, 庄司光男, 重田育照, 山口兆
2. 発表標題 光化学系IIの酸素発生中心におけるS1状態の中間体構造のDFTとCC法による解析
3. 学会等名 量子生命科学先端フォーラム2021冬の研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英
2. 発表標題 銅アミン酸化酵素におけるドパキノン補酵素のコンフォメーション制御機構
3. 学会等名 量子生命科学先端フォーラム2021冬の研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 QM/MM study of the large conformational change of quinone cofactor during the catalytic cycle of bacterial copper amine oxidases
3. 学会等名 2022 LBNL/CSA - Tsukuba/CCS Collaboration Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 堀 一将, 篠田 恵子, 浜本 晋, 氏原 哲朗, 川崎 寿, 富田 武郎, 西山 真
2. 発表標題 細胞膜脂肪酸組成が大腸菌の Na ⁺ /H ⁺ アンチポーター活性に与える影響
3. 学会等名 日本農芸化学会2022年度大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 篠田 恵子
2. 発表標題 大腸菌膜に埋め込まれた多剤排出トランスポーターAcrA-AcrB-AcrZ-ToIC 複合体のMDシミュレーション
3. 学会等名 「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム・研究交流会「富岳百景」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Shinoda, H. Kawasaki, S. Murakami, S. Raturi, A. V. Nair, H. Singh, B. Bai, H. W. van Veen
2. 発表標題 Involvement of conserved amino acids in ion transport pathways of multidrug and toxic compound extrusion (MATE) transporter
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 篠田恵子、川崎 寿
2. 発表標題 多剤排出トランスポーターMATEの分子動力学シミュレーション：イオンカップリング経路におけるカルボキシレートの役割
3. 学会等名 第94回日本生化学会年会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 篠田恵子
2. 発表標題 MATEトランスポーターの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第47回生体分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 O Miyashita
2. 発表標題 構造生物学へのハイブリッドアプローチ: シミュレーションと実験データの融合
3. 学会等名 第 1 回ピコバイオロジー研究会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 O Miyashita, S Tiwari, F Tama
2. 発表標題 Protocol for Assessing the Optimal Pixel Size to Improve the Accuracy of Single-Particle Cryo-Electron Microscopy Maps
3. 学会等名 CBI学会2020年大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 B Dasgupta, O Miyashita, F Tama
2. 発表標題 Modelling multiple types of three-dimensional hexameric conformations of bacterial heat-shock protein ClpB from low-resolution AFM image
3. 学会等名 The 3rd R-CCS International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S Tiwari, F Tama, O Miyashita
2. 発表標題 Retrieving potential three-dimensional biological shape matches from a small number of two-dimensional single particle XFEL diffraction patterns
3. 学会等名 The 3rd R-CCS International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S Tiwari, F Tama, O Miyashita
2. 発表標題 Retrieving potential three-dimensional biological shape matches from a small number of two-dimensional single particle XFEL diffraction patterns
3. 学会等名 Protein Society Meeting of Japan
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M Nakano, F Tama, O Miyashita
2. 発表標題 Requirement for 3D-reconstruction of biomolecule structure from single particle analysis using X-ray free electron laser diffraction images
3. 学会等名 The 3rd R-CCS International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M Nakano, F Tama, O Miyashita
2. 発表標題 Simulation study of tree dimensional reconstruction of ribosome from Xray free electron laser diffraction patterns
3. 学会等名 Protein Society Meeting of Japan
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英,
2. 発表標題 銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についてのQM/MM解析
3. 学会等名 量子生命科学会第2回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 QM/MM 法による銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についての理論解析
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 QM/MMで見えてきた酵素反応の特徴
3. 学会等名 高速分子動画領域会議（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男、村川武志、重田育照、林秀行、岡島俊英
2. 発表標題 Theoretical analyses on the protonation states of copper amine oxidase
3. 学会等名 高速分子動画領域会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M.Shoji
2. 発表標題 Recent Progress in the Reaction Mechanism of Water-Splitting in Photosystem II
3. 学会等名 70th JSCC（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M.Shoji, T.Murakawa, Y.Shigeta, H.Hayashi, T.Okajima
2. 発表標題 QM/MM study for the protonation states of copper amine oxidase
3. 学会等名 The 58th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 サルコシンオキシダーゼにおけるシクロプロピルグリシンの反応機構についての理論的解明
3. 学会等名 第93回日本生化学学会年会(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 構造探索手法(GLAS)による酵素反応機構の解明
3. 学会等名 SRPS2020(招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 庄司光男	4. 発行年 2024年
2. 出版社 株式会社エヌ・ティー・エス	5. 総ページ数 9
3. 書名 量子生命科学ハンドブック(監修 瀬藤光利、荒牧修平)	

1. 著者名 庄司光男	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Amazon Kindle direct publishing (電子書籍)	5. 総ページ数 65
3. 書名 フリーソフトで始める分子モデリング	

〔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	庄司 光男 (Shoji Mitsuo) (00593550)	筑波大学・計算科学研究センター・助教 (12102)	
研究分担者	篠田 恵子 (Shinoda Keiko) (80646951)	統計数理研究所・ものづくりデータ科学研究センター・特任助教 (62603)	

	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	高田 彰二 (Takada Shoji)	京都大学・理学研究科・教授	
研究協力者	重田 育照 (Shigeta Yasuteru)	筑波大学・計算科学研究センター・教授	
研究協力者	Lindahl Erik (Lindahl Erik)	Stockholm University・Professor	

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	杉田 有治 (Sugita Yuji)	理化学研究所・主任研究員	
研究協力者	Tama Florence (Tama Florence)	名古屋大学・物理学教室/トランスフォーマティブ生命分子 研究所・教授	
研究協力者	Srinivasa Raghavan Sriram (Srinivasa Raghavan Sriram)	理化学研究所・計算科学研究センター・特別研究員	
研究協力者	宮川 晃一 (Miyagawa Koichi)	筑波大学・計算科学研究センター・研究員	

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			
	フランス	ストラスブルク大	CNRS	
英国	ケンブリッジ大			