

令和 2 年 6 月 19 日現在

機関番号：33919

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K08257

研究課題名(和文) 薬物代謝酵素の動的構造揺らぎがリガンドおよび水分子の認識に与える影響

研究課題名(英文) Influence of structural flexibility of drug metabolizing enzyme on ligand recognition

研究代表者

小田 彰史(Oda, Akifumi)

名城大学・薬学部・教授

研究者番号：50433511

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：薬物代謝酵素シトクロムP450(CYP)、ジヒドロピリミジナーゼ、カルボキシエステラーゼについて、変異体や種差による静的・動的構造の違いをコンピュータシミュレーションによって明らかにした。特にタンパク質としての柔らかさの違いが活性部位の形状や補酵素の認識に影響を与えることが示されており、これが活性に影響を与えた可能性が示唆された。このような動的構造揺らぎはわずか1残基の違いによって変化しており、また同じCYPであっても分子種によって動的な構造揺らぎについては大きく異なっていることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

医薬品は体内に入った後、適切に行かなければならない。その際に機能するのが薬物代謝酵素であるが、遺伝多型によってその機能には個人差が生じやすい。薬物代謝における個人差は薬効および副作用の個人差に直結するため、遺伝多型が薬物代謝酵素に与える影響を明確にすることは薬物治療の個人差を解明する上で極めて重要である。本研究ではそのような薬物代謝酵素の機能の個人差を分子構造のレベルから解明する上で有用である。特に静的構造が似通っているように見える分子においてもその動的構造が異なることをシミュレーションによって明らかにしており、個人差の影響を最小化するための創薬へとつながりうる成果を得た。

研究成果の概要(英文)：In this study, static and dynamic structures of drug metabolizing enzymes, such as cytochrome P450 (CYP), dihydropyrimidinase and carboxylesterase, were elucidated by using computer simulations. For these enzymes, several mutants were investigated. The computational results suggest that the structural flexibility plays an important role in the structures of ligand binding pocket and the cofactor binding, and it influences on the enzymatic activity. The structural flexibilities were influenced by only one residue mutation. Even in the CYP family enzymes, dynamic structures of the different molecules were largely different.

研究分野：計算化学

キーワード：薬物代謝酵素 分子シミュレーション 遺伝多型 タンパク質構造柔軟性

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

医薬品が安全に機能するためには、十分な薬効があるだけでなく体内を適切に移動することができなければならない。医薬品の化学構造を変化させる薬物代謝酵素は、薬物の体内動態において極めて重要な役割を果たす。薬物代謝酵素の機能としては、不要となった薬物を排出しやすい形に変形したり、そのままでは薬効を示すことのできない化合物を活性体へと変形したりする作用が知られている。一方で薬物代謝酵素は様々な医薬品を認識するため、複数の医薬品を同時に摂取した場合、予期せぬ副作用が発現したり薬効が予想外に持続あるいは減弱したりといった問題を引き起こすことが知られている。このような薬物相互作用は医薬品の使用において大きな問題となり得る。しかし一方で基質が結合した場合と阻害剤が結合した場合の薬物代謝酵素の静的・動的構造の違いについては未だ明確になっていない部分が多い。コンピュータシミュレーションによって複合体の構造を検討した研究はいくつかあるものの、後述の遺伝多型と複合体形成の関係については十分に検討がされているとは言い難かった。さらに、一般に薬物代謝酵素のポケットは比較的広いことが多いが、その空洞を占めていると考えられる水分子の挙動については実験での解明が難しいこともあり、不明な点も多い。

薬物代謝酵素は遺伝多型の存在でも知られている。医薬品は人類が文明を築いた後に生まれた物質であるため、その代謝を担う薬物代謝酵素は進化の過程で十分な淘汰圧にさらされていない。そのため薬物代謝酵素をコードする遺伝子には多様な変異が起こっていることが多く、様々な個人差が存在する。この薬物代謝酵素の個人差はそのまま医薬品の薬効や副作用における個人差に直結しており、患者それぞれに対して適切な医療行為を行う上で重要なポイントとなる。このような「個の医療」を行うためには、遺伝多型によって生じた薬物代謝酵素変異体の性質を詳細に把握している必要がある。これまで代表者は実験研究者と共同で薬物代謝酵素シトクロム P450 (CYP) およびジヒドロピリミジナーゼ (DHP) の変異体の発現量や酵素活性について実験的に解明してきた。これまで多くの研究では、様々な研究者がそれぞれの環境下で測定を行っていたが、本代表者の行った共同研究では統一した環境下で酵素活性を測定しているため、各遺伝多型についてのデータを容易に比較できる。一方で膨大な数が存在する変異体すべての立体構造を実験的に解明するのは現実的ではないが、これまでに代表者らは分子シミュレーションによって計算機的に変異体の立体構造を明らかにしている。その結果、変異が活性に影響を与える理由を立体構造の観点から明らかにすることができた。また、そのシミュレーションに必要なツールの開発も行っている。しかしこれらはいずれも薬物代謝酵素変異体単独での静的・動的構造に留まっており、基質や阻害剤を取り込んだときの構造については十分に検討できていなかった。ましてや基質や阻害剤が侵入するルートの解明やスパーサーとしての役目を果たす水分子の挙動など、薬物代謝酵素変異体の動的性質がリガンド認識に与える影響についての詳細な知見は、代表者らによる研究のみならず、実験的・計算的にほとんど解明されていなかった。代表者らはタンパク質 - リガンドドッキングについて様々な手法の開発やベンチマーク等を行ってきており、その経験を生かすことで薬物代謝酵素の構造柔軟性(動的性質)がリガンド認識に与える影響について明らかにできるのではないかと考えて研究を開始した。

2. 研究の目的

本研究課題では、薬物代謝酵素のリガンド認識について、タンパク質とリガンドの単なる構造相補性だけに注目するのではなく、タンパク質の柔らかさや溶媒である水分子の動きにも注目して明らかにすることを目的とした。タンパク質の柔らかさはタンパク質の変形しやすさと直結しているため、タンパク質の柔らかさをシミュレーションによって求めることはリガンドの侵入・排出ルートの解明につながる。また、基質結合後のタンパク質立体構造の変化は、周囲に存在している別のタンパク質(たとえば CYP であれば電子を伝達する NADPH-シトクロム P450 還元酵素(CPR))との相互作用に影響を与え、その後の触媒サイクルの活性化などにもつながっている可能性がある。従ってリガンド結合前後での薬物代謝酵素の動的性質を解明することは、薬物代謝酵素の機能を解明する上できわめて重要となる。また、薬物代謝酵素は一般に複数の薬物の化学反応に関与することが多いため、リガンド結合ポケットは比較的サイズが大きい。その結果、薬物代謝酵素のリガンド結合ポケットには生体内に大量に存在する水分子が入る余地が残されていることが多々ある。この水分子が薬物代謝酵素のリガンド認識にどのような役割を果たしているのか(あるいはいないのか)も本研究課題で明らかにする。その際には、単に水分子が存在している・していないというだけでなく、どのようなルートで侵入しているか、またその水分子はポケット内に留まることができるのかといった、動的な性質についても評価する。それによってリガンド認識過程における水分子の挙動をダイナミックに表現できるのではないかと考えている。これらの性質について、野生型のみならず天然の変異体についても検討を行い、遺伝多型がリガンド認識に与える影響についても明らかにする。このように、単にタンパク質とリガンドがくっついた静止構造を得るだけでなく、リガンド結合前後に生体内で起こる現象について、遺伝多型による変異体も含めてコンピュータ上で再現するのが本研究の目的であった。

3. 研究の方法

薬物代謝酵素とリガンドとの複合体構造について、静止構造・動的性質の両方を分子シミュレーションを用いて明らかにした。CYP や DHP などの主要な分子については、既に実験的に立体構

造がわかっているものも多い。それらの分子に対しては、実験的に得られている構造を用いてシミュレーションを行い、その動的性質を明らかにした。その際には一部の残基に変異を導入した変異体についてもコンピュータ上で作成し、それらに対してもシミュレーションを行う。以前の我々の研究はナノ秒レベルのシミュレーションに留まっているが、本研究課題ではマイクロ秒レベルの長時間のシミュレーションを行い、より妥当性の高い構造を得た。手法としては、生体内環境（溶媒和・温度など）を模した分子動力学（MD）シミュレーションを用いる。これによって、結晶構造ではなく生体内環境下での野生型・変異型薬物代謝酵素の立体構造や動的性質を知ることができる。

MD シミュレーションでは溶液中で揺らいでいる薬物代謝酵素の立体構造が得られる。この揺らぎを利用して、薬物代謝酵素とリガンドとの複合体構造を作成した。すなわち、酵素の揺らいでいる構造を1つだけ用いるのではなく、複数の代表構造を抽出し、それらに対してドッキングを行うことで、induced fit も含めた動的な複合体形成をも考慮に入れた複合体構造構築を行った。一般にタンパク質とリガンドは固く構造を保ったままくっつくのではなく、互いに相互作用することで柔軟に構造を変化させながら複合体を形成する。MD シミュレーションの結果を用いることで、そのようなタンパク質の柔らかさを擬似的に取り込んでドッキングできる。

CYP、DHP などとは対照的に、カルボキシルエステラーゼ2（CES2）などいくつかの酵素では実験的には立体構造が得られていない。そこでこれらの分子については、まずホモロジーモデリングによって立体構造を予測した。予測構造は一般に歪みを含んでいることが多いため、これに対してまず構造最適化およびMDシミュレーションを行い、十分に歪みを除去してから変異体の構造を作成した。十分に精度の高い予測構造が得られた後は立体構造既知の酵素と同様の研究を行ったが、CES2 については生物種差があることが知られており、それについても検討した。具体的には、ヒトCES2 とイヌCES2 について立体構造を作成し、それらの性質を明らかにした。

酵素単独でのシミュレーションに加え、薬物代謝酵素 - リガンド複合体構造について、MD シミュレーションによってその動的性質および静止構造を求めた。まず、MD シミュレーションの期間を通じてリガンドが分離したり配置を大きく変えたりしないことを観察することで、複合体の予測構造の妥当性を評価した。さらにMDシミュレーションの結果を用いて、薬物代謝酵素の各部分の性質を評価した。リガンドが結合していないときとしているときとで構造を比較し、静止構造や動的性質に違いがある部分を抽出した。その部位はリガンド結合に伴った（あるいは先駆けた）変化の起こりやすい部分である可能性がある。その部分周辺の残基の動きや相互作用ネットワークの変遷を確認し、たとえば基質を取り込む入り口であるチャネルなど機能部位の同定や、あるいは特定のリガンドを認識したときにだけ起こる構造変化に注目した induced fit の解析などを行った。また、タンパク質中に存在する水分子の挙動についても、MDシミュレーションの結果から特に動きの少ない（すなわち特異的な相互作用が存在すると考えられる）水分子に注目し、リガンドと同様の解析を行った。

4. 研究成果

CYP については、ポケットの大きい CYP2C8 とポケットの小さい CYP2A6 について計算を行った。CYP2C8 については野生型と変異体での静的構造および柔軟性の変化を評価した。また、水素結合の変化についても検討した。その結果最も顕著に違いが見られたのは SRS2 および SRS3 に関与する FG 領域であった（図1）。この部位はもともと柔軟性が高く、変異が入ることによって静的構造・構造柔軟性ともに変化が起こりやすいことがわかった。この領域は基質認識において基質多様性と関わる部位であることが知られており、この部分の構造的変化が基質認識に影響を及ぼした可能性が示唆された。

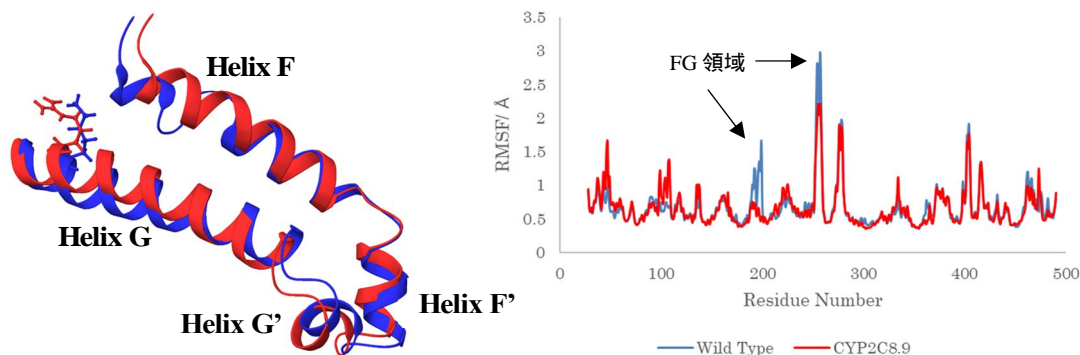


図1 CYP2C8.1 と CYP2C8.9 の静的および動的構造の違い

また、レドックスパートナー結合部位である CD ループおよび KL ループ部においても、CYP2C8.3, .6, .8, .14 において柔軟性の低下が見られた。構造そのものの変化ではなく柔軟性の変化が大きく、他の分子（この場合レドックスパートナー）の誘導適合による認識に影響する可能性がある。この部分の変化は、CYP が反応をするために必要な電子の受け渡しに影響を与え

るため、これが活性の低下を引き起こしたのではないかと推察される。

CYP2C8 については、基質であるモンテルカストとの複合体構造についても計算を行った。この複合体計算では、CYP2C8 のポケットの大きさが影響し、モンテルカストの RMSD が非常に高い値を示していた。このことから、CYP2C8 のモンテルカストは強固にポケットに結合しているのではなく、フレキシブルに結合している可能性が高い。モンテルカストが基質としても阻害剤としても作用する事実は、このシミュレーション結果の妥当性を示している。ポケットの大きさやタンパク質の構造柔軟性によって単一の化合物が基質・阻害剤の二面性を示すという結果は、薬物代謝酵素の機能においてタンパク質の動的構造が極めて重要な影響を及ぼすことを示している。さらにいくつかの水分子が特徴的な位置に存在しており、たびたび入れ替わりながらもその位置に水分子が存在し続けるという現象が観測された。これは、水分子のチャンネルを通じて CYP2C8 周辺の水は出入りを繰り返しているものの、活性部位において特定の機能を果たす水分子が存在していることを意味している。

また、CYP2A6 に関しては、CYP2A6.1, .6, .11, .17, .25, .26, .35, .36, .37, .43, .44 についてシミュレーションを行った。CYP2A6 は CYP2C8 と比べてポケットが小さく、レドックスパートナー結合部位である KL ループにおいて柔軟性に変化が見られたものの、総じて基質認識部位そのものに直接変化が現れる場合が多い。特に CYP2A6.6 などでは補酵素であるヘムに直接影響を与えるような L ヘリックス部位の相互作用様式に変化が生じており、また CYP2A6.11 ではヘムがタンパク質立体構造に影響を与えているなど、CYP における活性の中心的役割を果たす部分そのものが影響を受けている。もちろん CYP2A6 においても FG ループの構造柔軟性の変化など、動的構造の重要性を示唆する結果が得られているものの、ポケットの大きい CYP2C8 と比較して静的構造自体の変化が大きく、これが活性変化に重要な役割を果たしている可能性が考えられた。

DHP については、活性部位に金属イオンである亜鉛イオンを含む酵素である。シミュレーションの結果は、変異がこの亜鉛イオンの認識に影響を与えることを示唆していた。変異体 T68R および T343A については、2 つの準安定構造をとりうるということがシミュレーションにより判明した。どちらの変異体についても、野生型から大きく構造が変化した構造が存在する。従って、野生型から大きく構造がかけ離れてしまった際に DHP としての機能を失い、場合によってはタンパク質分解系などによってタンパク質が除去されることさえあり得るのではないかと推定された。これにより、このような準安定状態を含む変異体では活性が大きく低下してしまったのではないかと考えられる。また変異体 D81G はマイクロ秒レベルのシミュレーションでも構造が収束しており、全体の構造は野生型と比べて大きな違いはなかった。しかし、活性中心の亜鉛原子と配位しているアミノ酸残基の立体配座が大きく変化しており、これが活性に大きな影響を与えたと考えられる(図2)。また、G278D も 1 μ s のシミュレーションで構造が収束したが、こちらは基質ポケット形成に関与する 2 つのダイナミックループの柔軟性が上昇しループ構造が大きく変化した結果、活性が検出限界以下まで低下したと考えられる。

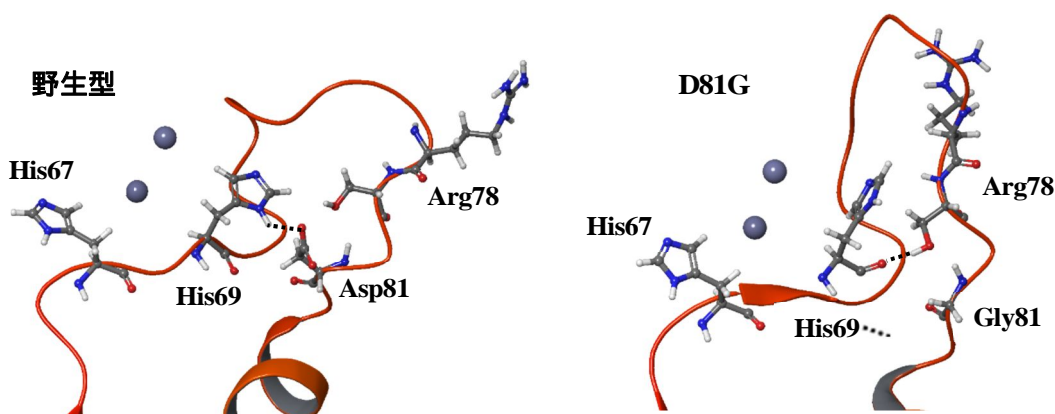


図2 野生型および変異体 D81G の活性部位周辺構造

一方で変異体 W360R 及び G435R はマイクロ秒レベルのシミュレーションで構造が収束せず、全体の立体構造が野生型と大きく異なっていることが示唆された。これは薬物代謝酵素の構造推定において比較的長時間の MD シミュレーションが必要であることを示唆しており、特に構造そのものが保てなくなるような変異において正しく立体構造を評価するにはマイクロ秒を超える計算が必要であることがわかる。

DHP では総じて多くの変異体で Pro73-Arg78 のループ構造の柔軟性の変化が見られ、これは活性部位において重要な亜鉛イオンの結合部位に近い。これは変異の影響が活性中心そのものに及びやすいことを示しており、DHP の遺伝多型においてはその点に留意する必要がある。

CES2 においては、ヒト CES2 とイヌ CES2 の立体構造を比較した。いずれも立体構造が実験的に解明していないため、ホモロジーモデリングによって立体構造を推定した。推定構造に対する MD シミュレーションの結果、数マイクロ秒におよびシミュレーションを通じてヒト CES2 の立

体構造は崩れておらず、妥当な立体構造が得られたと考えられる。CES2 は触媒サイクルの途上で触媒三残基のプロトン化状態が変化するが、異なるプロトン化状態においてもヒト CES2 の MD シミュレーションは安定な結果を与えた。一方でイヌ CES2 においてはシミュレーションの比較的初期から構造が大きく崩れ、ヒト CES2 と同等の数マイクロ秒のシミュレーション後では初期構造から離れた立体構造になっていた。これに関してもプロトン化状態にかかわらず構造が崩れており、イヌ CES2 はヒト CES2 とは大きく構造が異なる(あるいは安定に存在しない)のではないかと考えられる。これは実験によって得られた結果と一致しており、ホモロジーモデリングによる予測構造の妥当性を示唆している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計36件（うち査読付論文 36件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 15件）

1. 著者名 Watanabe Yurie, Fukuyoshi Shuichi, Kato Koichi, Hiratsuka Masahiro, Yamaotsu Noriyuki, Hirono Shuichi, Gouda Hiroaki, Oda Akifumi	4. 巻 74
2. 論文標題 Investigation of substrate recognition for cytochrome P450 1A2 mediated by water molecules using docking and molecular dynamics simulations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Graphics and Modelling	6. 最初と最後の頁 326 ~ 336
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmgs.2017.04.006	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 Hishinuma Eiji, Akai Fumika, Narita Yoko, Maekawa Masamitsu, Yamaguchi Hiroaki, Mano Nariyasu, Oda Akifumi, Hirasawa Noriyasu, Hiratsuka Masahiro	4. 巻 143
2. 論文標題 Functional characterization of 21 allelic variants of dihydropyrimidinase	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Biochemical Pharmacology	6. 最初と最後の頁 118 ~ 128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bcp.2017.06.121	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 Kato Koichi, Nakayoshi Tomoki, Fukuyoshi Shuichi, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 22
2. 論文標題 Validation of Molecular Dynamics Simulations for Prediction of Three-Dimensional Structures of Small Proteins	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1716 ~ 1716
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules22101716	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 Oda Akifumi, Fukuyoshi Shuichi, Kurimoto Eiji	4. 巻 136
2. 論文標題 Determination of molecular force field parameters for nitronyl nitroxide derivatives using quantum chemical calculations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 93 ~ 101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2017.03.009	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 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Shuichi Fukuyoshi, Ohgi Takahashi, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda	4. 巻 1866
2. 論文標題 Comparison of the activation energy barrier for succinimide formation from - and -aspartic acid residues obtained from density functional theory calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics	6. 最初と最後の頁 759-766
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbapap.2017.12.011	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 Akifumi Oda, Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Eiji Kurimoto, Ohgi Takahashi	4. 巻 1866
2. 論文標題 Influences of conformations of peptides on stereoinversions and/or isomerizations of aspartic acid residues	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics	6. 最初と最後の頁 783-788
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbapap.2018.01.006	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 Kaize Asako, Ohta Kiminori, Fujii Shinya, Oda Akifumi, Goto Tokuhito, Endo Yasuyuki	4. 巻 26
2. 論文標題 Novel androgen receptor full antagonists: Design, synthesis, and a docking study of glycerol and aminoglycerol derivatives that contain p-carborane cages	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Bioorganic & Medicinal Chemistry	6. 最初と最後の頁 3805~3811
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bmc.2018.06.007	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 加藤紘一、仲吉朝希、福吉修一、栗本英治、小田彰史	4. 巻 17
2. 論文標題 分子動力学法による小さいタンパク質の立体構造予測におけるシミュレーション時間の検討	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 名城大学総合研究所総合学術研究論文集	6. 最初と最後の頁 41-50
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 Watanabe Takashi, Saito Takahiro, Rico Evelyn Marie Gutierrez, Hishinuma Eiji, Kumondai Masaki, Maekawa Masamitsu, Oda Akifumi, Saigusa Daisuke, Saito Sakae, Yasuda Jun, Nagasaki Masao, Minegishi Naoko, Yamamoto Masayuki, Yamaguchi Hiroaki, Mano Nariyasu, Hirasawa Noriyasu, Hiratsuka Masahiro	4. 巻 156
2. 論文標題 Functional characterization of 40 CYP2B6 allelic variants by assessing efavirenz 8-hydroxylation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biochemical Pharmacology	6. 最初と最後の頁 420 ~ 430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bcp.2018.09.010	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 Saito Takahiro, Gutierrez Rico Evelyn Marie, Kikuchi Aoi, Kaneko Akira, Kumondai Masaki, Akai Fumika, Saigusa Daisuke, Oda Akifumi, Hirasawa Noriyasu, Hiratsuka Masahiro	4. 巻 33
2. 論文標題 Functional characterization of 50 CYP2D6 allelic variants by assessing primaquine 5-hydroxylation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Drug Metabolism and Pharmacokinetics	6. 最初と最後の頁 250 ~ 257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dmpk.2018.08.004	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 Oda A, Kato K, Morino M, Nakayoshi T, Fukuyoshi S, Saijo K, Ishioka C, Kurimoto E	4. 巻 1136
2. 論文標題 Prediction of the three-dimensional structures of histone deacetylase 1 complexed with romidepsin and FK-A5	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012019 ~ 012019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1136/1/012019	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 Nakayoshi T, Kato K, Fukuyoshi S, Takahashi O, Kurimoto E, Oda A	4. 巻 1136
2. 論文標題 Computational studies on cyclic imide formation mechanism of glutamic acid residues catalyzed by two water molecules	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012020 ~ 012020
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1136/1/012020	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 Kato K, Fujii K, Nakayoshi T, Watanabe Y, Fukuyoshi S, Ohta K, Endo Y, Yamaotsu N, Hirono S, Kurimoto E, Oda A	4. 巻 1136
2. 論文標題 Structural differences between the ligand-binding pockets of estrogen receptors alpha and beta	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012021 ~ 012021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1136/1/012021	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 Y, Kato K, Fukuyoshi S, Hiratsuka M, Yamaotsu N, Hirono S, Gouda H, Oda A	4. 巻 1136
2. 論文標題 Effect of the Arg456His mutation on the three-dimensional structure of cytochrome P450 1A2 predicted by molecular dynamics simulations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012023 ~ 012023
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1136/1/012023	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 Y, Oda A, Gouda H	4. 巻 1136
2. 論文標題 Molecular dynamics study of the interaction between PACAP (6' -38') and the N-terminal extracellular domain of the human splice variant hPAC1-R-short, aiming at the development of neuropathic pain medicine	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012024 ~ 012024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1136/1/012024	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 Tomohiro Yoshida, Tatsuki Fukami, Takaya Kurokawa, Saki Gotoh, Akifumi Oda, Miki Nakajima	4. 巻 111
2. 論文標題 Difference in substrate specificity of carboxylesterase and arylacetamide deacetylase between dogs and humans	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 European Journal of Pharmaceutical Sciences	6. 最初と最後の頁 167-176
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ejps.2017.09.040	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 Masaki Kumondai, Hiroki Hosono, Masamitsu Maekawa, Hiroaki Yamaguchi, Nariyasu Mano, Akifumi Oda, Noriyasu Hirasawa, Masahiro Hiratsuka	4. 巻 33
2. 論文標題 Functional characterization of 9 CYP2A13 allelic variants by assessment of nicotine C-oxidation and coumarin 7-hydroxylation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Drug Metabolism and Pharmacokinetics	6. 最初と最後の頁 82-89
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dmpk.2017.11.004	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 -

1. 著者名 Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Ohgi Takahashi, Akifumi Oda	4. 巻 116
2. 論文標題 Computational studies on non-succinimide-mediated stereoinversion mechanism of aspartic acid residues assisted by phosphate	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Molecular Physics	6. 最初と最後の頁 686-696
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2017.1414964	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 Akifumi Oda, Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Eiji Kurimoto, Noriyuki Yamaotsu, Shuichi Hirono, Ohgi Takahashi	4. 巻 30
2. 論文標題 Validation of molecular force field parameters for peptides including isomerized amino acids	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chirality	6. 最初と最後の頁 332-341
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chir.22821	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 Koichi Kato, Takahisa Furuhashi, Koichi Kato, Akifumi Oda, Eiji Kurimoto	4. 巻 163
2. 論文標題 The assembling mechanism of coiled-coil domains of the yeast cargo receptors Emp46p/47p and the mutational alteration of pH-dependency of complex formation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Biochemistry	6. 最初と最後の頁 441-446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/jb/mvy011	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 Hikaru Fujita, Satoshi Kakuyama, Shuichi Fukuyoshi, Naoko Hayakawa, Akifumi Oda, Munetaka Kunishima	4. 巻 83
2. 論文標題 Triazine-Based Cationic Leaving Group: Synergistic Driving Forces for Rapid Formation of Carbocation Species	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4568-4580
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.8b00331	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 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Shuichi Fukuyoshi, Ohgi Takahashi, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda	4. 巻 30
2. 論文標題 Computational studies on the water-catalyzed stereoinversion mechanism of glutamic acid residues in peptides and proteins	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chirality	6. 最初と最後の頁 527-535
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chir.22841	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 Kato Koichi, Nakayoshi Tomoki, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 4
2. 論文標題 Computational Studies on the Nonenzymatic Deamidation Mechanisms of Glutamine Residues	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 3508 ~ 3513
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.8b03199	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 Zhang Yu, Goto Masuo, Oda Akifumi, Hsu Pei-Ling, Guo Ling-Li, Fu Yan-Hui, Morris-Natschke Susan, Hamel Ernest, Lee Kuo-Hsiung, Hao Xiao-Jiang	4. 巻 24
2. 論文標題 Antiproliferative Aspidosperma-Type Monoterpenoid Indole Alkaloids from Bousignonia mekongensis Inhibit Tubulin Polymerization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1256 ~ 1256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules24071256	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 Nakayoshi Tomoki, Kato Koichi, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 123
2. 論文標題 Possible Mechanisms of Nonenzymatic Formation of Dehydroalanine Residue Catalyzed by Dihydrogen Phosphate Ion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3147 ~ 3155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b10386	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 Nakayoshi Tomoki, Fukuyoshi Shuichi, Kato Koichi, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 20
2. 論文標題 Computational Studies on Water-Catalyzed Mechanisms for Stereoconversion of Glutarimide Intermediates Formed from Glutamic Acid Residues in Aqueous Phase	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 2410 ~ 2410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms20102410	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 Yoshida Yukihiko, Fujigaki Hidetsugu, Kato Koichi, Yamazaki Kyoka, Fujigaki Suwako, Kunisawa Kazuo, Yamamoto Yasuko, Mouri Akihiro, Oda Akifumi, Nabeshima Toshitaka, Saito Kuniaki	4. 巻 9
2. 論文標題 Selective and competitive inhibition of kynurenine aminotransferase 2 by glycyrrhizic acid and its analogues	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 10243
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-46666-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 Ohta Kiminori, Ogawa Takumi, Kato Koichi, Oda Akifumi, Endo Yasuyuki	4. 巻 29
2. 論文標題 ER subtype selectivity of m-carborane-containing phenols: C-alkyl groups on the m-carborane cage enhance ER selectivity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2290 ~ 2293
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bmcl.2019.06.025	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 Oda Akifumi, Nakayoshi Tomoki, Kato Koichi, Fukuyoshi Shuichi, Kurimoto Eiji	4. 巻 9
2. 論文標題 Three dimensional structures of putative, primitive proteins to investigate the origin of homochirality	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 11594
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-48134-z	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 Kanamasa Shin, Yamaguchi Daiki, Machida Chiyoko, Fujimoto Tsukasa, Takahashi Anna, Murase Masataka, Fukuyoshi Shuichi, Oda Akifumi, Satou Kenji, Takahashi Hiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Draft Genome Sequence of Saccharomyces cerevisiae Strain Pf-1, Isolated from Prunus mume	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Microbiology Resource Announcements	6. 最初と最後の頁 e01169-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1128/MRA.01169-19	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 Kanamasa Shin, Minami Tomoyuki, Okabe Mitsuyasu, Park Enoch Y., Fujimoto Tsukasa, Takahashi Anna, Murase Masataka, Fukuyoshi Shuichi, Oda Akifumi, Satou Kenji, Takahashi Hiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Draft Genome Sequence of Aspergillus terreus High-Itaconic-Acid-Productivity Mutant TN-484	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Microbiology Resource Announcements	6. 最初と最後の頁 e01170-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1128/MRA.01170-19	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 仲吉朝希、加藤紘一、福吉修一、栗本英治、小田彰史	4. 巻 18
2. 論文標題 スクシニミドおよびグルタルイミド構造に対する古典的分子力場パラメータの評価	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 名城大学総合研究所総合学術研究論文集	6. 最初と最後の頁 19-28
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 Gutierrez Rico Evelyn Marie, Kikuchi Aoi, Saito Takahiro, Kumondai Masaki, Hishinuma Eiji, Kaneko Akira, Chan Chim Wai, Gitaka Jesse, Nakayoshi Tomoki, Oda Akifumi, Saito Sakae, Hirasawa Noriyasu, Hiratsuka Masahiro	4. 巻 35
2. 論文標題 CYP2D6 genotyping analysis and functional characterization of novel allelic variants in a Ni-Vanuatu and Kenyan population by assessing dextromethorphan O-demethylation activity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Drug Metabolism and Pharmacokinetics	6. 最初と最後の頁 89 ~ 101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dmpk.2019.07.003	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 Nakayoshi Tomoki, Kato Koichi, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 5
2. 論文標題 Computational Studies on the Mechanisms of Nonenzymatic Intramolecular Cyclization of the Glutamine Residues Located at N-Termini Catalyzed by Inorganic Phosphate Species	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 9162 ~ 9170
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b04384	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 Nakayoshi Tomoki, Kato Koichi, Fukuyoshi Shuichi, Takahashi Hiro, Takahashi Ohgi, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 1868
2. 論文標題 Computational studies on nonenzymatic succinimide-formation mechanisms of the aspartic acid residues catalyzed by two water molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Proteins and Proteomics	6. 最初と最後の頁 140459 ~ 140459
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbapap.2020.140459	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 Kato Koichi, Nakayoshi Tomoki, Sato Mizuha, Kurimoto Eiji, Oda Akifumi	4. 巻 5
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulations for Three-Dimensional Structures of Orotate Phosphoribosyltransferases Constructed from a Simplified Amino Acid Set	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13069-13076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01012	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29件(うち招待講演 1件/うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Akifumi Oda, Koichi Kato, Mayu Morino, Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Ken Saijo, Chikashi Ishioka, Eiji Kurimoto
2. 発表標題 Prediction of three-dimensional structures of histone deacetylase 1 complexed with romidepsin and its analog
3. 学会等名 XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yurie Watanabe, Koichi Kato, Shuichi Fukuyoshi, Masahiro Hiratsuka, Noriyuki Yamaotsu, Shuichi Hirono, Hiroaki Gouda, Akifumi Oda
2. 発表標題 Effect of the Arg456His mutation on the threedimensional structure of cytochrome P450 1A2 predicted by molecular dynamics simulations
3. 学会等名 XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Akifumi Oda, Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Eiji Kurimoto, Noriyuki Yamaotsu, Shuichi Hirono, Ohgi Takahashi
2. 発表標題 Validation of molecular force field parameters for D-amino acids using quantum chemical calculations of model peptides
3. 学会等名 Chirality 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Akifumi Oda, Tomoki Nakayoshi, Shuichi Fukuyoshi, Eiji Kurimoto, Ohgi Takahashi
2. 発表標題 Influences of conformations of peptides on stereoinversions and/or isomerizations of aspartic acid residues
3. 学会等名 The 3rd International Conference of D-Amino Acid Research (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Koichi Kato, Yukiho Shimizu, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Analysis of functional segments in the coiled coil domains of yeast cargo receptors Emp46p/47p and application to pH sensitive devices
3. 学会等名 19th International Union of Pure and Applied Biophysics and 11th European Biophysical Societies' Association Congress (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 成田瑠子、菱沼英史、齋藤さかえ、安田純、長崎正朗、前川正充、小田彰史、平澤典保、平塚真弘
2. 発表標題 日本人2049人の全ゲノム解析から同定された8種のDHPレアバリエント活性変化
3. 学会等名 第56回日本薬学会東北支部大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小田彰史、加藤紘一、仲吉朝希、福吉修一、栗本英治
2. 発表標題 計算機によるドッキングで得られた複合体構造候補に対する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第45回構造活性相関シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 菱沼英史、赤井文香、成田瑠子、前川正充、山口浩明、眞野成康、小田彰史、平澤典保、平塚真弘
2. 発表標題 21種類のジヒドロピリミジナーゼ遺伝子多型バリエントの機能解析
3. 学会等名 日本薬物動態学会第32回年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 公文代將希、細野寛貴、前川正充、小田彰史、平澤典保、平塚真弘
2. 発表標題 ニコチンC-酸化活性およびクマリン7-水酸化活性におけるCYP2A13遺伝子多型バリエーション酵素の機能変化
3. 学会等名 日本薬物動態学会第32回年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 仲吉朝希、加藤紘一、福吉修一、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 アミノ酸残基の非酵素的反応はタンパク質構成選択に影響を与えたか
3. 学会等名 生命の起原および進化学会第43回学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小田彰史、仲吉朝希、加藤紘一、福吉修一、栗本英治
2. 発表標題 ラセミ体のアミノ酸から構築された原始タンパク質の立体構造の推定
3. 学会等名 日本薬学会第138年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦絵梨、仲吉朝希、加藤紘一、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる野生型および変異型シトクロムP450 2C8 の構造および柔軟性の評価
3. 学会等名 第64回日本薬学会東海支部大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Koichi Kato, Tomoki Nakayoshi, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Modification of pH-dependence for coiled-coil assembly by introducing glutamate residue to the hydrophobic surface: computational design and experimental mutagenesis
3. 学会等名 22nd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Theoretical study for the influence of Asp-residue stereoinversion and/or isomerization on the three-dimensional structure of ribonuclease A
3. 学会等名 22nd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Computational Studies on Pyroglutamylation Mechanism of N-Terminal Glutamic Acid Residues in Aqueous Conditions
3. 学会等名 59th Sanibel Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小田彰史
2. 発表標題 酵素で制御されていない生体内反応についての計算化学的研究
3. 学会等名 第7回物理・分析系若手研究者セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小田彰史、仲吉朝希、加藤紘一、森部聖士、野田奈津子、栗本英治
2. 発表標題 GADVアミノ酸セットにグルタミン酸が加わることの構造生物学的意味
3. 学会等名 生命の起原および進化学会第44回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 野倉里香、仲吉朝希、加藤紘一、松浦絵梨、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションを用いた野生型および変異型CYP2A6の立体構造の推定
3. 学会等名 日本薬学会第139年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 名倉鮎香、仲吉朝希、加藤紘一、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 野生型および変異型ジヒドロピリミジナーゼの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本薬学会第139年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 成田瑠子、菱沼英史、齋藤さかえ、安田純、長崎正朗、前川正充、小田彰史、平澤典保、平塚真弘
2. 発表標題 日本人3554人の全ゲノム解析から同定されたジヒドロピリミジナーゼ遺伝子多型におけるバリエーション酵素の機能変化
3. 学会等名 日本薬学会第139年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kumondai M, Ito A, Saito T, Saito S, Yasuda J, Nagasaki M, Kinoshita K, Yamamoto M, Oda A, Hirasawa N, Hiratsuka M
2. 発表標題 Functional characterization of 11 allelic variants of CYP2C9 identified in 3554 Japanese individuals
3. 学会等名 International Conferences on Cytochrome P450 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 名倉鮎香、仲吉朝希、加藤紘一、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる野生型および変異型ジヒドロピリミジナーゼの構造解析
3. 学会等名 第65回日本薬学会東海支部大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Ohgi Takahashi, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Computational studies on nonenzymatic succinimide-formation mechanisms of the aspartic acid residues catalyzed by two water molecules
3. 学会等名 The 4th International Conference of D-Amino Acid Research (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koichi Kato, Kaho Miura, Tomoki Nakayoshi, Kikuo Tsukamoto, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Effects of main chain conformations on succinimide formation from asparagine residues
3. 学会等名 The 4th International Conference of D-Amino Acid Research (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoki Nakayoshi, Koichi Kato, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Influence of the conformations of alpha A-crystallin peptides on the isomerization rates of aspartic acid residues
3. 学会等名 The 4th International Conference of D-Amino Acid Research (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 仲吉朝希、加藤紘一、松浦絵梨、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるCYP2C8変異体の立体構造解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoki Nakayoshi, Kota Wanita, Koichi Kato, Eiji Kurimoto, Akifumi Oda
2. 発表標題 Computational Analysis on Deamidation Mechanisms of Asparagine Residues Catalyzed by Acetic Acid
3. 学会等名 60th Sanibel Symposium (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 日置翔、仲吉朝希、加藤紘一、平塚真弘、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる野生型および変異型CYP2A13の立体構造の推定
3. 学会等名 日本薬学会第140年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野裕二郎、仲吉朝希、加藤紘一、深見達基、中島美紀、栗本英治、小田彰史
2. 発表標題 ヒトおよびイヌのカルボキシルエステラーゼ2の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本薬学会第140年会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

生物物理化学研究室 名城大学 薬学部 http://www-yaku.meijo-u.ac.jp/kenkyu/biophysical/

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