

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 1 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05645

研究課題名（和文）マルチスケール分子動力学シミュレーションによる細胞内分子動態の解明

研究課題名（英文）Multi-scale molecular dynamics simulation on biomolecular dynamics in crowded cellular environments

研究代表者

杉田 有治 (Sugita, Yuji)

国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員

研究者番号：80311190

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 152,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では分子動力学ソフトウェアGENESISを用いて、粗視化・全原子・QM/MMモデルを含むマルチスケール分子動力学法を開発し、「富岳」などに最適化・並列化を行い、その成果をフリーソフトウェアとして一般に公開した。この計算基盤を用いて、酵素反応と蛋白質構造ダイナミクスの関係や分子混雑環境における蛋白質と基質結合などの大規模計算を行うとともに、計算と実験の連携によって溶液中や液滴中におけるマルチドメイン蛋白質の動的構造と相互作用を調べた。本研究を通して、従来ブラックボックスであった液滴や細胞内環境における蛋白質の動的構造を原子・残基レベルで解像度で明らかにすることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発したマルチスケールMD計算法は、理研を中心に開発しているGENESISソフトウェアに導入され、フリーソフトウェアとしてすでに公開されている。アカデミアの研究者だけでなく、機能性材料や創薬開発などを行う産業界の研究者の中にも徐々に利用者が増えており、社会的意義も大きい。また、本研究で取り組んだ細胞内環境での酵素反応ダイナミクスや液滴形成と制御における蛋白質構造のダイナミクスの解析は、実験と理論の垣根を超えて、細胞内環境での生命現象を理解するために必要な研究であり学術的な意義がある。

研究成果の概要（英文）：In this study, we developed multi-scale molecular dynamics methods including coarse-grained, all-atom, and QM/MM models using the molecular dynamics software GENESIS. We also optimized and parallelized it for "Fugaku" and other supercomputers, and made the results available to the public as free software. Using this computational platform, we have performed large-scale calculations of enzymatic reactions in solution and protein-ligand binding in crowded environments to understand molecular mechanisms underlying enzyme reaction dynamics and crowding effects on the ligand binding. We also investigated the dynamic structures and interactions of multi-domain proteins in solution and in droplets in the collaboration between computation and experiment. Through this study, we were able to clarify the dynamic structure of proteins in droplets and intracellular environments at the atomic and residue level resolutions.

研究分野：計算生物物理学

キーワード：分子動力学 マルチスケールモデル 細胞内分子混雑環境 液液相分離 酵素反応ダイナミクス NMR SAXS スーパーコンピュータ

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

蛋白質などの生体分子が働く現場である細胞内部は無数の生体分子で混み合った分子混雑環境である。この環境が蛋白質の構造・ダイナミクス・機能に与える影響は長年調べられており、混み合った環境で分子同士が重ならないことによる効果(排除体積効果)が支配的であると考えられてきた(Zimmerman et al., *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 1993)。これにより、水溶液中よりも細胞内では蛋白質の天然状態がより安定に存在すると予測され、細胞内での酵素活性は分子混雑による拡散速度の低下と反応遷移状態の安定化の競合によって制御されていると考えられていた。

一方で、近年の構造生物学において特に2つの大きな発展が見られた。それは、細胞内の蛋白質の分子動態を直接観測する in-cell NMR (Inomata et al., *Nature* 2009, Sakakibara et al., *Nature* 2009) と、極低温の溶液中で原子解像度に近い構造情報が得られるクライオ電子顕微鏡である(Callaway, *Nature* 2015, as a review)。この発展によって、非結晶条件下での生体分子の立体構造やそのダイナミクスが次々と明らかになった。その中には、従来の考え方と相反する実験結果が得られた例も存在する(Inomata et al., *Nature* 2009)。これに加えて、安定した立体構造を持たない天然変性蛋白質(IDP: Intrinsically Disordered Protein)や非特異的な相互作用による巨大な凝集体(液液相分離による膜のないオルガネラ)の形成(Shin et al., *Science* 2017)など、従来見られなかった細胞内現象も数多く発見された。さらに、古くから知られる鍵と鍵穴のような相補的な形状を持つ蛋白質間の相互作用だけでなく、総電荷の異なる2つのIDPによる強い結合(Borgia et al., *Nature* 2018)や、細胞質において豊富に存在するATPの可溶剤としての役割なども注目されてきた(Patel et al., *Science* 2017)。

2. 研究の目的

本研究では、原子・分子のレベルから細胞内環境をボトムアップ的に構築し、効率の良いシミュレーション手法を開発することで、複雑な細胞内生命現象を計算機中に再現する。その計算結果を細胞内の蛋白質動態を直接観察できる実験によって検証し、分子モデルや計算手法の向上にフィードバックする。

具体的な課題として、以下の3つを研究の目的として掲げた。

- ・ 超並列分子動力学(MD)ソフトウェア GENESIS (<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/>)を自ら開発している理研の研究グループが、QM/MMや粗視化MD(CGMD)を新たに導入する。
- ・ ベイズ推定に基づく理論などによりQM/MM、全原子MD(AAMD)、CGMDを接続し、大規模な生体分子系の長時間ダイナミクスを高精度に計算する。
- ・ 分子から細胞レベルの生命現象を GENESIS という単独のプラットフォームで再現し、実験によって検証する。

これにより、以下の2つ学術的「問い」に答えることを目指した。

- ・ 酵素反応は細胞内環境の影響をどのように受けているのか?
- ・ 蛋白質構造柔軟性が液液相分離、すなわち、液滴の形成や制御にどのような役割を果たすか?

3. 研究の方法

本研究では独自性の高い計算手法を開発し、GENESISにその機能を導入する。サブ課題Aでは、QM/MMとCGMDの計算手法とプログラムを開発する。本研究では既存の量子化学プログラムをGENESISから呼び出すことでQM/MM計算を行う。量子化学プログラムに分子の座標を入力し、エネルギーとその微分を計算する。エネルギーの一次微分が原子に働く力であるため、これを使って分子構造の最適化とMD計算が可能である。CGMDを行うために、立体構造情報を使うモデル(SB: Structural based model)と物理化学的モデル(PB: Physical based model)の2種類が用いられてきた。細胞内環境での分子構造と分子間相互作用を得るためには、SBとPBを組み合わせた新しいモデルが必要である。AAMDは本研究でメインに開発する項目ではないが、スパコン「富岳」でテストを実施した後、本研究でも利用する。QM/MMとCGMDについても「富岳」を利用した超並列アルゴリズム等を開発し、大規模な生体分子系の長時間ダイナミクスを実現する。

サブ課題Bでは、スケールの異なる分子モデルを用いたMD計算を統計力学、機械学習、ベイズ推定等により接続する。高精度計算(例えばQM/MMやAAMD)で得られた結果を低精度・高速の計算(AAMDやCGMD)に反映させ長時間ダイナミクスの信頼性を向上させるだけでなく、低精度計算で広い時空間を探索した後高精度計算で精密化することも行う。

サブ課題Cとサブ課題Dはマルチスケール計算手法を用いた応用的課題である。サブ課題Cでは細胞内環境が酵素反応に与える影響を理解するためにトリプトファン合成酵素(TRPS: Tryptophan synthase)をターゲットとし、QM/MMとAAMDを組み合わせた解析を行うことで、

蛋白質の構造変化によって生じた異なる反応場での化学反応や基質の拡散などを調べる。また、細胞内分子混雑環境での蛋白質構造、基質の拡散、蛋白質と基質の相互作用などに関する知見を分子シミュレーションから得る。

サブ課題 D では、蛋白質構造柔軟性が膜のないオルガネラ形成に果たす役割を調べる。ショウジョウバエ Drk やそのヒトのホモログである GRB2 は、SH3-SH2-SH3 という 3 つのドメインを持つアダプター蛋白質であり、いずれも Proline-rich motif (PRM) をもつ SOS1 と結合する。このような蛋白質間の弱い過渡的な相互作用が液液相分離を引き起こすことが既に知られている。溶液状態での Drk や GRB2 の立体構造・SOS1 の相互作用を、溶液 NMR で観測し、MD 計算と比較する。液液相分離中での Drk や GRB2 の立体構造・SOS1 との相互作用を理論・実験連携研究によって明らかにし、蛋白質構造の柔軟性と液液相分離の関係を理解する。

4. 研究成果

研究計画に従い、QM/MMとCGMDのプログラムと計算手法の開発を行った。従来のQM/MM計算では、量子化学プログラムの実行ファイルを、System関数を用いることでGENESISから呼び出していた（従来法）。本研究課題では、塩崎（QSimulate Inc.）らによって開発されている高速量子化学プログラムQSimulateをライブラリーとしてGENESISから直接呼び出す方法でQMとMMを結合することができるようになった（新規法）。これによって、従来法と比較して遥かに高速なQM/MM計算を実現し、酵素反応解析を実現するQM/MM反応経路探索アルゴリズムを開発した（Yagi et al., *J. Phys. Chem. B* 2021）。この手法では、String法を用いて最小エネルギー経路を探索し、その経路上の自由エネルギー変化をQM/MM MDを用いたUmbrella Sampling (US) で見積もる。この手法をTryptophan synthase (TRPS)に適用し、2つの活性部位にかかわるアロステリックな効果について調べた。GENESISには、小・中規模系の計算や新しい理論やモデルのテストに適したATDYNと、大規模系を空間分割することで「京」や「富岳」で超並列計算を実現するSPDYNの2つのMDコードが存在する。本研究課題では、ATDYNだけでなくSPDYNでもQM/MM計算を行うことを可能とした（Yagi et al., *in preparation*）。ATDYNでは原子数が10万を超えると性能が低下するが、SPDYNでは原子数が30万を超えても1 ns/day以上の性能を保つことができ、世界最高水準のQM/MMプログラムを開発した（図1）。新規法は、QM/MM計算を細胞内環境の酵素反応などに今後適用するために重要な技術である。

立体構造情報を使う粗視化モデル（SB: Structural based model）の代表であるGoモデルと、分子間相互作用を記述する物理化学的粗視化モデル（PB: Physical based model）であるDebye-Hückelモデルや液液相分離の計算に近年良く用いられているHPSモデル等をGENESISに導入した（Tan et al., *PLoS Comp. Biol.* 2022）。この際、二面角エネルギーの計算を安定に実現する工夫を行い、論文として発表した（Tan et al., *J. Chem. Phys.* 2020）。さらに、複数の立体構造情報を用いて構造遷移を予測する手法（Multi-basin Goモデル）の一つであるMacro-mixing modelに含まれる最適なパラメタを半自動的に求める手法を新たに開発した（Shinobu et al., *J. Chem. Info. Model.* 2021）。蛋白質、天然変性蛋白質、核酸に加え脂質分子のモデルも新たに導入し（Ugarte LaTorre et al., *J. Chem. Phys.* 2023）、細胞内環境を我々独自の粗視化モデルで記述できる基盤を構築できた。

CGMDはGENESISに含まれる既存のMDプログラムの一つであるATDYNに当初導入され、これを最適化することで既存のソフトウェアに比較して数倍の高速化を実現した。しかし、ATDYNでは超巨大生体分子系の長時間ダイナミクスを行うことは困難であった。そのためにCGDYNという新しいMDプログラムをあらたに開発した。CGDYNの特徴は、図2に示すように、系の密度の大小に応じて空間分割の粒度を変えることで、それぞれのCPUでできるだけ均一な演算を行うことである。さらに、MD計算が進むにつれて、その密度分布が変化した場合にも、自動的に空間分割をやり直す機能が含まれている。これらにより、GROMACSやLAMMPSなどのソフトウェアを凌駕する世界最高水準のパフォーマンスを実現した。CGDYNを用いることで、従来ソフトウェアでは不可能であった小さい液滴から大きな液滴に成長する過程のシミュレーションに世界で初めて成功した（Jung, Tan, and Sugita, *Nature*

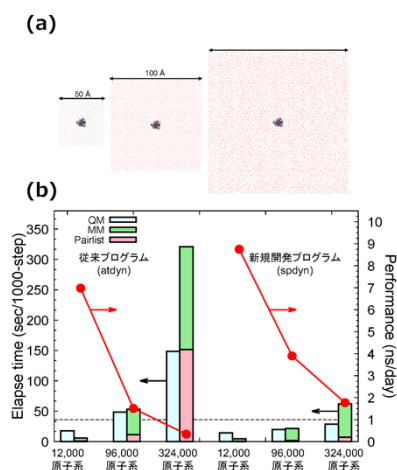


図 1. QM/MM 計算における従来法と新規法のパフォーマンスの差

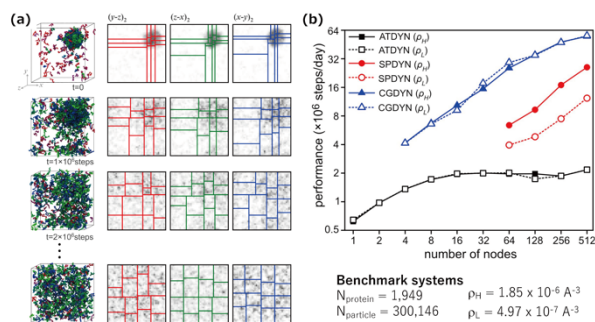


図 2. CGDYN による不均一な空間分割法による具体例(左)と「富岳」でのパフォーマンス(右)

Comm. 2024)。既にATDYNに含まれる基本機能はCGDYNに移植されており、「富岳」上でCGDYNを利用することで、他に類をみない時空間規模のCGMDを行うことができる。分担者の優 (前橋工科大学) らは、細胞スケールのMDデータ解析を並列実行するプログラム (SPANNA) を開発し、GENESIS最新バージョンに導入した (Yu et al., *J. Comp. Chem.* 2024)。

異なるスケールの分子モデルを用いたMD計算の連結については、既に開発していたデータ同化と機械学習に基づく手法の総説 (Matsunaga et al., *Curr. Opin. Struct. Biol.* 2020) をまとめるとともに、この手法を整理し、松永 (埼玉大学) が開発してきたツールの使い方を共有した。また、ベイズ統計を用いた計算手法の一つであるMELD法 (MacCallum et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2015) をGENESISに正しく導入し、小蛋白質Trp-cageを対象にテスト計算を行った。結果は良好であり、以下に述べるようにGRB2の動的構造をモデリングするために活用した。この計算手法を使うことで、AAMDで得られた距離情報をCGMDで用いるなど異なるスケールを接続することが可能になった。さらに、QM/MM MDを高速化するために、Neural Network Potentialを用いたML/MM MD計算法を開発し、酵素反応に適用した (Lei et al., *J. Chem. Phys.* 2024)。

八木らが開発したQM/MMの新規法はAAMDと同じ周期境界条件を用いるため、QM/MMとAAMDを容易に連結することができる。

これらの開発によってGENESISの最新の公開版 (Ver. 2.1) は、AAMD、CGMD、QM/MMを全て利用可能なマルチスケールMDを実現するユニークなソフトウェアになった (図3)。CGMDやQM/MMの開発については個別の論文として報告しているが、統合ソフトウェアパッケージとしてGENESIS 2.1についての論文を現在まとめた (Jung, Yagi, Tan, et al., *J. Phys. Chem. B* 2024)。

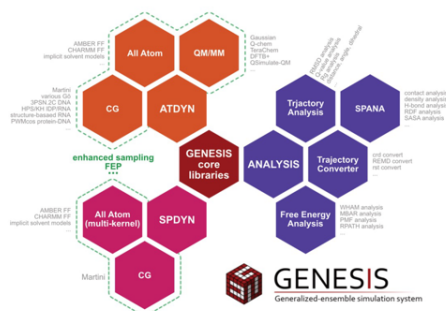


図3. GENESIS Ver. 2.1の機能。コアライブラリと、ATDYN, CGDYN, ANALYSISを含む。

酵素反応は通常、単一の化学反応ではなく、複数の化学反応がサイクルを形成している。酵素はそれぞれの化学反応の過程で、立体構造を変化させることで、このサイクルを一方向に回していくことができる。酵素反応を計算化学で理解するためには、構造変化をAAMDで計算し、酵素反応過程をQM/MM計算で予測する必要がある。本研究ではまずTRPSの α と β サブユニットの基質結合状態を変え、それに伴う構造変化をAAMDとQM/MMで予測した (図4)。

その結果、 α に基質が結合すると、 β のCOMMドメインが大きく開き、 β リガンドの結合を誘引することが分かった。さらに、水素結合ネットワークが変化し、 β のD305の水素結合相手が切り替わることで、 β -reaction stage Iが発熱的となり、酵素反応が促進される。このように、酵素反応とアロステリックな構造変化との関係が明らかになった (Ito et al., *J. Phys. Chem. B* 2022, Ito et al., *J. Chem. Phys.* 2023)。分担者の優 (前橋工科大学) らは、TRPSのサブユニット間を移動するインドール (IND) の輸送機構を分子レベルで調査するために、String法を用いてINDの輸送経路を求めた。疎水チャネルに存在する2つのゲートが移動に伴い開閉する様子が確認された。またUmbrella SamplingによりIND輸送に伴う自由エネルギー地形が明らかになった (Yu et al., *in preparation*)。

液相分離については、GRB2とSOS1、さらにGRB2のホモログであるDrkとSosの相互作用の解析を行うとともに、天然変性蛋白質であるTDP-43の液滴形成とHero蛋白質による液滴形成の制御について調べた (Tan et al., *JACS Au* 2023)。Hero蛋白質は電荷を有する天然変性蛋白質であり、TDP-43による液滴において静電相互作用を用いて、その形成と崩壊を制御していた (図5)。この図に示すように、Hero蛋白質は液滴内での静電反発力

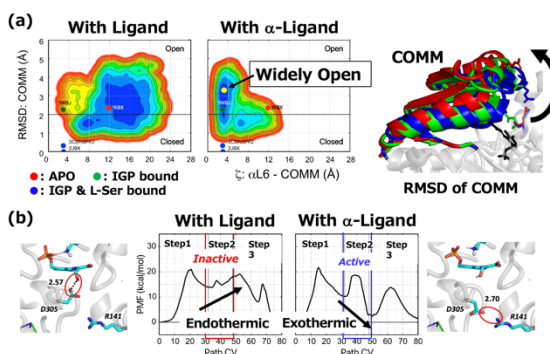


図4. TRPSの構造変化(a)と酵素反応(b)に関するアロステリック効果

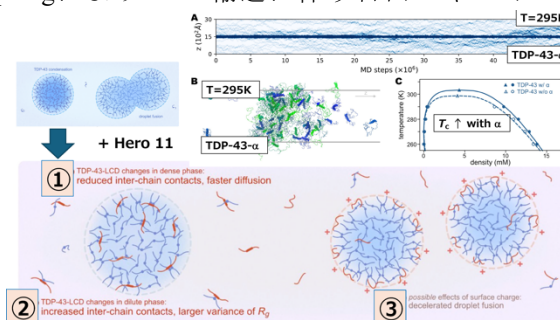


図5. TDP-43の液滴の形成とHero11による制御機構

による液滴の崩壊、希薄溶液中でのHero蛋白質とTDP-43複合体の安定化、小さな液滴の表面に結合することで液滴融合を阻害するなどの可能性が考えられる。液滴の融合は大きな系の計算になるため、従来法（スラブモデル）では困難であったが、我々が開発した CGMDを用いた分子動力学計算を「富岳」で行うことによって、数万個の蛋白質が含まれる液滴融合の計算を実現した。（Jung, Tan, and Sugita, *Nature Comm.* 2024）

NMRによって得られたGRB2の溶液構造情報は、すでに報告されているX線結晶構造（Maignan et al., *Science* 1995）と溶液X線小角散乱（SAXS）（Yuzawa et al., *J. Mol. Biol.* 2001）の結果がいずれも一致していなかった。そこで、分担者の池谷（東京都立大学）らと協力し、GRB2単量体の構造情報のみを取り出すことができるSEC-SAXS実験を行い、溶液中におけるGRB2単量体の動的構造情報を得た。NMRとSEC-SAXSデータの両方と一致する構造多形を得るために、Integrative Modeling法（Reweighting after Restraining Scheme）を新たに開発し、3つの構造アンサンブルがGRB2の溶液構造多形を表現できることを示した（Ikeya, Oide, et al., *in preparation*）。

GRB2とSOS1は、膜受容体であるLATと3分子で液液相分離（LLPS）を形成することが知られている。分担者の伊藤・池谷（東京都立大学）らはGRB2とSOS1の2分子だけでもLLPS形成を起こすことを見出した（図6）。光学顕微鏡観察から、形成される液滴のサイズは、GRB2とSOS1に含まれるSH3ドメインとPRMの数が、LLPS形成に大きく関与することが明らかになった。加えて、メチル選択標識試料を用いた滴定実験より、LLPS形成時の相互作用に関わるアミノ酸残基が示された。次に、GRB2とSOS1由来のペプチドとのNMR滴定実験を行い、精密な解離定数（ k_D ）解析を行った結果、SOS1-PR中のS1-S10のPRMのうち、S4、S5、S9、S10がGRB2と強く結合し、S4、S5、S9はNSH3と、S10はNSH3およびCSH3に同程度の親和性で結合することが分かった。また、SOS PRMsの結合によるGRB2のドメイン相対配置の変化を示唆する結果も得られた。

GRB2のショウジョウバエホモログであるDrkはGRB2と同様のドメイン構造を持つが、NSH3のみで解析をした場合、folded型とunfolded型の構造多形になっていることが知られている。まず、これまで構造生物学的解析が行われてこなかったDrkのSH2およびCSH3ドメインについて溶液中の立体構造とダイナミクスの解析を行った。DrkはSosおよびDosと相互作用することが知られており、SosおよびDosにはそれぞれ2か所の有力なPRMがあることが知られている。DrkのNSH3およびCSH3に対してSosおよびDos由来のPRMペプチドを用いてNMR滴定実験を行った結果、図7に示すような親和性の差異が判明した。すなわちSos由来の2つのPRM（S1およびS2）はいずれもNSH3により強い親和性があるのに対して、Dos由来の2つのPRM（S1およびS2）はNSH3とCSH3とほぼ同程度の親和性を持っていた。このような2つのSH3のPRMに対する親和性の差、およびSosとDosとの親和性の差が、ショウジョウバエにおけるDrkの機能制御に関与している可能性がある。

以上、本研究では、分子動力学ソフトウェアGENESISを開発プラットフォームとして用いて、粗視化モデルやQM/MMモデルなどの利用も可能としたマルチスケール分子動力学計算法を開発した。この計算法を含むGENESIS最新バージョン（Ver.2.1）はすでにフリーソフトウェアとして一般に公開している。GENESISは「富岳」などの超並列スーパーコンピュータに最適化・並列化されており、世界最高水準の演算性能を示すことができた。この計算基盤を用いて、TRPSなどの酵素反応ダイナミクスや分子混雑環境における蛋白質と基質結合の分子機構など、細胞内環境が蛋白質に与える影響を調べることができた。また、実験との連携で溶液中や液滴中におけるマルチドメイン蛋白質の動的構造と相互作用を調べた。この研究を通して、従来ブラックボックスであった液滴や細胞内環境における蛋白質の振る舞いを原子・残基レベルで明らかにした。細胞内分子動態を理論計算と実験による共同研究で解明することは非常に強力な手段であり、今後も様々な生命現象の理解と予測に活用することができる。

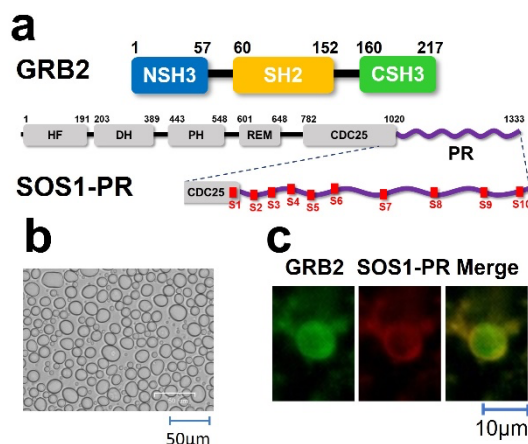


図6. GRB2とSOS1によるLLPS形成. a, GRB2およびSOS1のドメイン構造. b, GRB2とSOS-PRの混合によって生じる液滴. c, bの液滴中のGRB2およびSOS1-PRの局在.

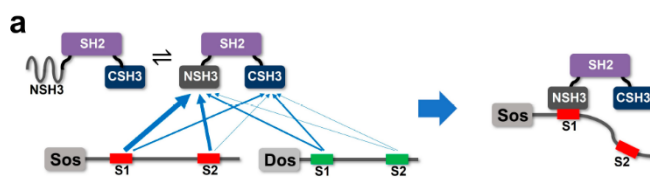


図7. Drkに対するSosおよびDos由来のPRMの親和性の差異. 親和性の強さを矢印の太さで模式的に示した. 最も強いDrk-NSH3とSos-S1の結合が両者の多価相互作用の初期に起こると考えられる.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計54件（うち査読付論文 54件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 32件）

1. 著者名 Yu Isseki, Mori Takaharu, Matsuoka Daisuke, Surblys Donatas, Sugita Yuji	4. 巻 45
2. 論文標題 SPANAs: Spatial decomposition analysis for cellular scale molecular dynamics simulations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 498-505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.27260	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 Ikari Masaomi, Yagi Hiromasa, Kasai Takuma, Inomata Kohsuke, Ito Masahiro, Higuchi Kae, Matsuda Natsuko, Ito Yutaka, Kigawa Takanori	4. 巻 3
2. 論文標題 Direct Observation of Membrane-Associated H-Ras in the Native Cellular Environment by In-Cell ¹⁹ F-NMR Spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 1658 ~ 1669
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.3c00108	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 Tariq Mishal, Ikeya Teppei, Togashi Naoyuki, Fairall Louise, Kamei Shun, Mayooramurugan Sannojah, Abbott Lauren R, Hasan Anab, Bueno-Alejo Carlos, Sukegawa Sakura, Romartinez-Alonso Beatriz, Muro Campillo Miguel Angel, Hudson Andrew J, Ito Yutaka, Schwabe John WR, Dominguez Cyril, Tanaka Kayoko	4. 巻 7
2. 論文標題 Structural insights into the complex of oncogenic KRas4B G12V and Rgl2, a RalA/B activator	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Life Science Alliance	6. 最初と最後の頁 e202302080
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.26508/lsa.202302080	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 Sayeesh Pooppadi Maxin, Iguchi Mayumi, Suemoto Yusuke, Inoue Jin, Inomata Kohsuke, Ikeya Teppei, Ito Yutaka	4. 巻 24
2. 論文標題 Interactions of the N- and C-Terminal SH3 Domains of Drosophila Drk with the Proline-Rich Peptides from Sos and Dos	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 14135 ~ 14135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms241814135	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 Jung Jaewoon, Kobayashi Chigusa, Sugita Yuji	4. 巻 44
2. 論文標題 Acceleration of generalized replica exchange with solute tempering simulations of large biological systems on massively parallel supercomputer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1740 ~ 1749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.27124	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 Dokainish Hisham M., Sugita Yuji	4. 巻 122
2. 論文標題 Structural effects of spike protein D614G mutation in SARS-CoV-2	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Biophysical Journal	6. 最初と最後の頁 2910 ~ 2920
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bpj.2022.11.025	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 Ugarte La Torre Diego, Takada Shoji, Sugita Yuji	4. 巻 159
2. 論文標題 Extension of the iSoLF implicit-solvent coarse-grained model for multicomponent lipid bilayers	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 75101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0160417	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 Ito Shingo, Sugita Yuji	4. 巻 307
2. 論文標題 Free-energy landscapes of transmembrane homodimers by bias-exchange adaptively biased molecular dynamics	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Biophysical Chemistry	6. 最初と最後の頁 107190 ~ 107190
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bpc.2024.107190	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 Jung Jaewoon, Tan Cheng, Sugita Yuji	4. 巻 15
2. 論文標題 GENESIS CGDYN: large-scale coarse-grained MD simulation with dynamic load balancing for heterogeneous biomolecular systems	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 3370
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-024-47654-1	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 Lim Heo, Yuji Sugita, Michael Feig	4. 巻 73
2. 論文標題 Protein assembly and crowding simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Curr. Opin. Struct. Biol.	6. 最初と最後の頁 102340
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.sbi.2022.102340	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 Cheng Tan, Jaewoon Jung, Chigusa Kobayashi, Diego Ugarte, Shoji Takada, Yuji Sugita	4. 巻 18
2. 論文標題 Implementation of residue-level coarse-grained models I GENESIS for large-scale molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 PLoS Comp. Biol.	6. 最初と最後の頁 e1009578
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1371/journal.pcbi.1009578	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 Shingo Ito, Kiyoshi Yagi, Yuji Sugita	4. 巻 126
2. 論文標題 Computational analysis on the allostery of tryptophan synthase: relationship between alpha/beta-ligand binding and distal domain closure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. B	6. 最初と最後の頁 3300-3308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01556	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 Ai Shinobu, Suyong Re, Yuji Sugita	4. 巻 9
2. 論文標題 Practical Protocols for efficient sampling of kinase-inhibitor binding pathways using two-dimensional replicaexchange molecular dynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Front. Mol. Biosci.	6. 最初と最後の頁 878830
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fmolb.2022.878830	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 Hiraku Oshima, Yuji Sugita	4. 巻 62
2. 論文標題 Modified Hamiltonian in FEP Calculations for Reducing the Computational Cost of Electrostatic Interactions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Chem. Inf. Model.	6. 最初と最後の頁 2846-2856
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.1c01532	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 Mao Oide, Yuji Sugita	4. 巻 157
2. 論文標題 Protein Folding Intermediates on the Dimensionality Reduced Landscape with UMAP and Native Contact Likelihood	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 75101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0099094	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 Daiki Matsubara, Kento Kasahara, Hisham Dokainish, Hiraku Oshima, Yuji Sugita	4. 巻 27
2. 論文標題 Modified protein-water interactions in CHARMM36m for thermodynamics and kinetics of proteins in dilute and crowded solutions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 5726
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules27175726	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 Hisham M. Dokainish, Yuji Sugita	4. 巻 122
2. 論文標題 Structural Effects of Spike Protein D614G Mutation in SARS-CoV-2	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Biophys. J.	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bpj.2022.11.025	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 Yuxia Zhang, Chigusa Kobayashi, Xiaohan Cai, Satoshi Watanabe, Akihisa Tsutsumi, Masahide Kikkawa, Yuji Sugita, Kenji Inaba	4. 巻 41
2. 論文標題 Multiple sub state structures of SERCA2b reveal conformational overlap at transition steps during the catalytic cycle	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Cell reports	6. 最初と最後の頁 111760
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.celrep.2022.111760	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 Yasuhiro Matsunaga, Motoshi Kamiya, Hiraku Oshima, Jaewoon Jung, Shingo Ito, and Yuji Sugita	4. 巻 14
2. 論文標題 Use of multistate Bennett acceptance ratio method for free-energy calculations from enhanced sampling and free-energy perturbation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Biophys. Rev.	6. 最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s12551-022-01030-9	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 Ai Niitsu, Yuji Sugita	4. 巻 25
2. 論文標題 Towards de novo design of transmembrane α -helical assemblies using structural modelling and molecular dynamics simulation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 3595-3606
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP03972A	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 Tomonori Ogane, Daisuke Noshiro, Toshio Ando, Atsuko Yamashita, Yuji Sugita, Yasuhiro Matsunaga	4. 巻 18
2. 論文標題 Development of Hidden Markov Modeling of Molecular Orientations and Structures from High-Speed Atomic Force Microscopy Time-Series Images	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 PLoS Comp. Biol.	6. 最初と最後の頁 e1010384
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1371/journal.pcbi.1010384	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 Cheng Tan, Ai Niitsu, Yuji Sugita	4. 巻 3
2. 論文標題 Highly charged proteins and their repulsive interactions antagonize biomolecular condensation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 834-848
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.2c00646	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 Shingo Ito, Kiyoshi Yagi, Yuji Sugita	4. 巻 158
2. 論文標題 Allosteric regulation of beta-reaction stage I in tryptophan synthase upon the alpha-ligand binding	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 115101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0134117	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 Sayeesh P.M., Teppei Ikeya, Haruka Sugawara, Riki Watanabe, Masaki Mishima, Kohsuke Inomata, Yutaka Ito	4. 巻 625
2. 論文標題 Insight into the C-terminal SH3 domain mediated binding of Drosophila Drk to Sos and Dos	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Biochem. Biophys. Res. Commun.	6. 最初と最後の頁 87-93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrc.2022.08.007	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 該当する

1. 著者名 Kiyoshi Yagi, Shingo Ito, Yuji Sugita	4. 巻 125
2. 論文標題 Exploring the Minimum-Energy Pathways and Free-Energy Profiles of Enzymatic Reactions with QM/MM Calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. B	6. 最初と最後の頁 4701-4713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c01862	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 Ai Shinobu, Chigusa Kobayashi, Yasuhiro Matsunaga, Yuji Sugita	4. 巻 61
2. 論文標題 Coarse-Grained Modeling of Multiple Pathways in Conformational Transitions of Multi-Domain Proteins	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Inf. Model.	6. 最初と最後の頁 2427-2443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.1c00286	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 Takaharu Mori, Genki Terashi, Daisuke Matsuoka, Daisuke Kihara, Yuji Sugita	4. 巻 61
2. 論文標題 Efficient Flexible Fitting Refinement with Automatic Error Fixing for De Novo Structure Modeling from Cryo-EM Density Maps	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Inf. Model.	6. 最初と最後の頁 3516-3528
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.1c00230	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 Kento Kasahara, Suyong Re, Grzegorz Nawrocki, Hiraku Oshima, Chiemi Mishima-Tsumagari, Yukako Miyata-Yabuki, Mutsuko Kukimoto-Niino, Isseki Yu, Mikako Shirouzu, Michael Feig, Yuji Sugita	4. 巻 12
2. 論文標題 Reduced Efficacy of a Src Kinase Inhibitor in Crowded Protein Solution.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4099
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-24349-5	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 該当する

1. 著者名 Jaewoon Jung, Kento Kasahara, Chigusa Kobayashi, Hiraku Oshima, Takaharu Mori, and Yuji Sugita	4. 巻 17
2. 論文標題 Optimized Hydrogen Mass Repartitioning Scheme Combined with Accurate Temperature/Pressure Evaluations for Thermodynamic and Kinetic Properties of Biological Systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 5312-5321
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.1c00185	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 Kiyoshi Yagi, Yuji Sugita	4. 巻 17
2. 論文標題 Anharmonic Vibrational Calculations Based on Group Localized Coordinates: Applications to Internal Water Molecules in Bacteriorhodopsin	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 5007-5020
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.1c00060	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 Keisuke Fujiyama, Naoki Kato, Suyong Re, Kiyomi Kinugasa, Kohei Watanabe, Ryo Takita, Toshihiko Nogawa, Tomoya Hino, Hiroyuki Osada, Yuji Sugita, Shunji Takahashi, Shingo Nagano	4. 巻 60
2. 論文標題 Molecular basis for two stereoselective Diels-Alderases that produce decalin skeletons.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 22401-22410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202106186	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 Chigusa Kobayashi, Yasuhiro Matsunaga, Jaewoon Jung, Yuji Sugita	4. 巻 118
2. 論文標題 Structural and energetic analysis of metastable intermediate states in the E1P囊摘2P transition of Ca ²⁺ -ATPase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proc. Natl. Acad. Sci. USA	6. 最初と最後の頁 e2105507118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2105507118	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 Kiyoshi Yagi, Suyong Re, Takaharu Mori, Yuji Sugita	4. 巻 72
2. 論文標題 Weight average approaches for predicting dynamical properties of biomolecules	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Curr. Opin. Struct. Biol.	6. 最初と最後の頁 88-94
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.sbi.2021.08.008	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 Hisham M Dokainish, Suyong Re, Takaharu Mori, Chigusa Kobayashi, Jaewoon Jung, Yuji Sugita	4. 巻 11
2. 論文標題 The inherent flexibility of receptor binding domains in SARS-CoV-2 spike protein	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 eLife	6. 最初と最後の頁 e75720
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7554/eLife.75720	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 Takayuki Nagae, Masashi Unno, Taiki Koizumi, Yohei Miyanoiri, Tomotsumi Fujisawa, Kento Masui, Takanari Kamo, Kei Wada, Toshihiko Eki, Yutaka Ito, Yuu Hirose, Masaki Mishima	4. 巻 118
2. 論文標題 Structural basis of the protochromic green/red photocycle of the chromatic acclimation sensor RcaE	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.	6. 最初と最後の頁 e2024583118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2024583118	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 Hiromasa Yagi, Takuma Kasai, Elisa Rioual, Teppei Ikeya, Takanori Kigawa	4. 巻 118
2. 論文標題 Molecular mechanism of glycolytic flux control intrinsic to human phosphoglycerate kinase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.	6. 最初と最後の頁 e2112986118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2112986118	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 伊藤 隆	4. 巻 36
2. 論文標題 SARS-CoV-2感染機序についての構造生物学的研究の現状	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 エアロゾル研究	6. 最初と最後の頁 237-245
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11203/jar.36.237	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 池谷鉄兵, 伊藤 隆	4. 巻 53
2. 論文標題 溶液NMR法を用いた蛋白質立体構造計算の最近の動向	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 細胞	6. 最初と最後の頁 48-52
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 池谷鉄兵, 伊藤 隆	4. 巻 5
2. 論文標題 溶液NMR法を用いた蛋白質立体構造計算の最近の動向	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 アグリバイオ	6. 最初と最後の頁 980-986
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 Ren Weitong, Dokainish Hisham M., Shinobu Ai, Oshima Hiraku, Sugita Yuji	4. 巻 125
2. 論文標題 Unraveling the Coupling between Conformational Changes and Ligand Binding in Ribose Binding Protein Using Multiscale Molecular Dynamics and Free-Energy Calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2898 ~ 2909
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c11600	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 Jung Jaewoon, Kobayashi Chigusa, Kasahara Kento, Tan Cheng, Kuroda Akiyoshi, Minami Kazuo, Ishiduki Shigeru, Nishiki Tatsuo, Inoue Hikaru, Ishikawa Yutaka, Feig Michael, Sugita Yuji	4. 巻 42
2. 論文標題 New parallel computing algorithm of molecular dynamics for extremely huge scale biological systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 231 ~ 241
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26450	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 Mori Takaharu, Jung Jaewoon, Kobayashi Chigusa, Dokainish Hisham M., Re Suyong, Sugita Yuji	4. 巻 120
2. 論文標題 Elucidation of interactions regulating conformational stability and dynamics of SARS-CoV-2 S-protein	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biophysical Journal	6. 最初と最後の頁 1060 ~ 1071
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bpj.2021.01.012	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 Kulik Marta, Mori Takaharu, Sugita Yuji	4. 巻 8
2. 論文標題 Multi-Scale Flexible Fitting of Proteins to Cryo-EM Density Maps at Medium Resolution	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Frontiers in Molecular Biosciences	6. 最初と最後の頁 631854-1 ~ 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fmolb.2021.631854	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 Dokainish Hisham M., Sugita Yuji	4. 巻 22
2. 論文標題 Exploring Large Domain Motions in Proteins Using Atomistic Molecular Dynamics with Enhanced Conformational Sampling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 270 ~ 270
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms22010270	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 Jung Jaewoon, Sugita Yuji	4. 巻 153
2. 論文標題 Group-based evaluation of temperature and pressure for molecular dynamics simulation with a large time step	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 234115 ~ 234115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0027873	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 Kim Seonghoon, Oshima Hiraku, Zhang Han, Kern Nathan R., Re Suyong, Lee Jumin, Roux Benoit, Sugita Yuji, Jiang Wei, Im Wonpil	4. 巻 16
2. 論文標題 CHARMM-GUI Free Energy Calculator for Absolute and Relative Ligand Solvation and Binding Free Energy Simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 7207 ~ 7218
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.0c00884	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 Matoba Kazuaki, Kotani Tetsuya, Tsutsumi Akihisa, Tsuji Takuma, Mori Takaharu, Noshiro Daisuke, Sugita Yuji, Nomura Norimichi, Iwata So, Ohsumi Yoshinori, Fujimoto Toyoshi, Nakatogawa Hitoshi, Kikkawa Masahide, Noda Nobuo N.	4. 巻 27
2. 論文標題 Atg9 is a lipid scramblase that mediates autophagosomal membrane expansion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Structural & Molecular Biology	6. 最初と最後の頁 1185 ~ 1193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41594-020-00518-w	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 Oshima Hiraku, Re Suyong, Sugita Yuji	4. 巻 60
2. 論文標題 Prediction of Protein-Ligand Binding Pose and Affinity Using the gREST+FEP Method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 5382 ~ 5394
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.0c00338	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 Tan Cheng, Jung Jaewoon, Kobayashi Chigusa, Sugita Yuji	4. 巻 153
2. 論文標題 A singularity-free torsion angle potential for coarse-grained molecular dynamics simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044110 ~ 044110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0013089	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 Sugiki Toshihiko, Yamaguchi Yoshihiro, Fujiwara Toshimichi, Inouye Masayori, Ito Yutaka, Kojima Chojiro	4. 巻 10
2. 論文標題 In-cell NMR as a sensitive tool to monitor physiological condition of Escherichia coli	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2466-1 ~ 2466-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-59076-2	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 Nishida Noritaka, Ito Yutaka, Shimada Ichio	4. 巻 1864
2. 論文標題 In situ structural biology using in-cell NMR	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects	6. 最初と最後の頁 129364 ~ 129364
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbagen.2019.05.007	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 Aizu Takahiro, Suzuki Takumi, Kido Akihiro, Nagai Kan, Kobayashi Ayaho, Sugiura Reiko, Ito Yutaka, Mishima Masaki	4. 巻 1864
2. 論文標題 Domain selective labeling for NMR studies of multidomain proteins by domain ligation using highly active sortase A	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects	6. 最初と最後の頁 129419 ~ 129419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbagen.2019.129419	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 Tamura Koichi, Sugita Yuji	4. 巻 11
2. 論文標題 Free Energy Analysis of a Conformational Change of Heme ABC Transporter BhuUV-T	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2824 ~ 2829
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c00547	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 Matsunaga Yasuhiro, Sugita Yuji	4. 巻 61
2. 論文標題 Use of single-molecule time-series data for refining conformational dynamics in molecular simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Current Opinion in Structural Biology	6. 最初と最後の頁 153 ~ 159
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.sbi.2019.12.022	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167件 (うち招待講演 105件 / うち国際学会 58件)

1. 発表者名 優乙石, 伊東真吾, 八木清, 杉田有治
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of the substrate channeling in tryptophan synthetase
3. 学会等名 第61回生物物理学会年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yutaka Ito, Mei Toyoda, Shiori Suehiro, Kaito Shima, Teppei Ikeya, Takafumi Suzuki, Masayuki Yamamoto, Kohsuke Inomata
2. 発表標題 In-cell NMR studies of the Keap1-Nrf2 system
3. 学会等名 Asia-Pacific Nuclear Magnetic Resonance (APNMR) 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yutaka Ito , Tepei Ikeya , Sayeesh P.M. , Mao Oide , Yuji Sugita
2. 発表標題 NMR studies of multi-domain adaptor proteins in signal transduction pathways
3. 学会等名 TJ2024 (Taiwan-Japan NMR Symposium 2024) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤 隆
2. 発表標題 In-cell NMRを用いたKeap1-Nrf2系の解析
3. 学会等名 NMRシンポジウム 環境応答の構造生物学 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤 隆
2. 発表標題 多次元NMRの原理
3. 学会等名 2023年度日本分光学会主催秋期セミナー「NMR分光法の基礎と応用」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Tepei Ikeya , Mao Oide , W. Ren , Keita Tateno , Takami Ando , Haruka Sugasawa , Yuji Sugita , Yutaka Ito
2. 発表標題 Analysis of the mechanism underlying multivalent interactions between GRB2 and SOS1 and their LLPS using solution NMR
3. 学会等名 第61回生物物理学会年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池谷鉄兵, 菅澤はるか, 富樫直之, 林 俊文, 美川 務, 杉田有治, 伊藤 隆
2. 発表標題 GRB2とSOS1による多価相互作用と液液相分離の溶液NMR解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 猪股晃介, 豊田芽生, 島 海翔, 長峰萌華, 末広志織, 池谷鉄兵, 鈴木隆史, 山本雅之, 伊藤 隆
2. 発表標題 In-cell NMRにおける細胞試料管理
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Sayeesh PM, Mayuki Iguchi, Haruka Sugasawa, Kaksuke Inomata, Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 Interaction of N-and C-terminal SH3 domains of Drosophila adapter protein Drk with Sos and Dos
3. 学会等名 The 19th European Magnetic Resonance Congress (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 屋部祥大, 田岸亮馬, 鴨志田一, 美川 務, 猪股晃介, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 In-cell NMRを用いたlinear diubiquitinの細胞内での立体構造解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大久保里佳, 堀川皓央, 伊藤かおり, 菱倉直樹, 渡邊吏輝, 三島正規, 猪股晃介, 小手石泰康, 澤井仁美, 城 宣嗣, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 異種核多次元NMRによる根粒菌マルチドメイン蛋白質FixJの立体構造解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Sayeesh PM, Mayumi Iguchi, Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 Structural and dynamic studies on the Drosophila adapter Protein Drk
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 豊田芽生, 猪股晃介, 末広志織, 島 海翔, 長峰萌華, 池谷鉄兵, 鈴木隆史, 山本雅之, 伊藤 隆
2. 発表標題 ストレス応答型の転写制御に関するKeap1-Nrf2複合体のIn-cell NMR解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 助川咲良, 富樫直之, P.M. Sayeesh, 菅澤はるか, 猪股晃介, 田仲加代子, 伊藤 隆, 池谷鉄兵
2. 発表標題 溶液NMRによるKRASとRGL2の相互作用の解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 富樫直之, 助川咲良, 菅澤はるか, 美川 務, 猪股晃介, 田仲加代子, 伊藤 隆, 池谷鉄兵
2. 発表標題 NMRピークの線形解析を用いたKRAS/RGL2RBD滴定データの定量化
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 井口真由美, P.M. Sayeesh, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 Drk蛋白質のN末端およびC末端SH3ドメインとSos/Dos由来ペプチドとの相互作用解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮田裕貴, 菅澤はるか, 猪股晃介, 伊藤 隆, 池谷鉄兵
2. 発表標題 溶液NMRによるUbiquitin C-terminal Hydrolase L3 (UCHL3)の構造・ダイナミクス解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 林 俊文, 館野桂太, 菅澤はるか, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 GRB2とSOS1による多価相互作用の溶液NMR解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 加藤聖人, Sayeesh PM, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 蛋白質の立体構造に対する分子クラウディングの影響の解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 菱倉直樹, 渡邊史輝, 大久保里佳, 堀川皓央, 伊藤かおり, 三島正規, 猪股晃介, 小手石泰康, 澤井仁美, 城 宣嗣, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 NMRによるFixL-FixJ二成分シグナル伝達系の機能解析
3. 学会等名 第62回NMR討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 How cellular environments are regulated by non-specific molecular interaction
3. 学会等名 Biomolecules and Nanostructures 8 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Multi-scale molecular dynamics simulations on protein function in intracellular environments
3. 学会等名 CCP2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Jaewoon Jung, Yuji Sugita
2. 発表標題 Accurate Langevin integration for isothermal-isobaric condition with a large time step
3. 学会等名 CCP2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Enhanced Conformational Sampling for Protein Dynamics and Function
3. 学会等名 8th Polish-Korean Conference on Protein Folding (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Protein dynamics and functions using enhanced MD simulations
3. 学会等名 CECAM Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Crowding effects on protein structure, dynamics, and functions
3. 学会等名 The 21st KIAS Conference on Protein Folding and Function (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Cheng Tan, Ai Niitsu, Jaewoon Jung, Yuji Sugita
2. 発表標題 Regulation of Biomolecular Condensation Studied with Large-Scale Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations in GENESIS
3. 学会等名 第61回生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Coarse-grained modeling and simulations of protein and lipid dynamics
3. 学会等名 MBSJ（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita, Mao Oide, Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 Monomeric Structures of GRB2 in Solution by Integrated Modeling
3. 学会等名 EMBO workshop on Computational Structural Biology（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Protein Functions in Crowded Cellular Environments
3. 学会等名 The 6th Symposium on Biophysics Postgraduate Research in Hong Kong（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yuji Sugita, Mao Oide, Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 Integrated Modeling of Flexible Multi-Domain Protein Structures in Solution
3. 学会等名 9th Polish-Korean Conference on Protein Folding (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Refinement of Markov State Model using experimental data and nonlinear dimensional reduction methods
3. 学会等名 ACS Symposium on Markov State Modeling of Conformational Dynamics in the Wake of Machine Learning (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 非断熱QM/MM分子動力学計算による光駆動タンパク質の反応ダイナミクス
3. 学会等名 第20回「高速分子動画」オンラインセミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 量子化学と分子動力学の融合によるアニオン交換膜の理論解析
3. 学会等名 第1回有機イオニクスワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi
2. 発表標題 Reaction dynamics of light-driven protein studied by non-adiabatic QM/MM molecular dynamics simulations
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 Yuji Sugita
2. 発表標題 Conformational Dynamics and Functions of Proteins in Crowded Cellular Environments
3. 学会等名 BPS Thematic Meeting Hamburg (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 細胞内環境における蛋白質の構造・ダイナミクス・機能
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 森貴治
2. 発表標題 分子動力学計算と実験データに基づくタンパク質複合体立体構造モデリング
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 伊東真吾, 八木清, 杉田有治
2. 発表標題 分子動力学計算によるトリプトファン合成酵素におけるアロステリック機構の解明
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本橋昌大, 大出真央, 宗行英朗, 杉田有治
2. 発表標題 分子動力学計算によるF1-ATPaseのリン酸放出経路の探索
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大出真央, 杉田有治
2. 発表標題 クライオ電子顕微鏡像に基づく蛋白質動態の自由エネルギー地形推定法の開発と検討
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 信夫愛, 李秀栄, 杉田有治
2. 発表標題 Src Kinase inhibitor binding free energy landscape sampled by Molecular-dynamics simulations: effect of ligand size and flexibility
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 尾嶋拓, 杉田有治
2. 発表標題 静電相互作用計算を高速化した自由エネルギー摂動法の開発
3. 学会等名 第22回日本蛋白質科学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 計算科学で挑む細胞内環境の生物学
3. 学会等名 第48回生体分子科学討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-energy calculations of protein-ligand binding in solution and crowded environments
3. 学会等名 WCB2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 QM/MM法の開発と生体分子の振動解析と化学反応への応用
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 杉田有治
2. 発表標題 分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と細胞内における蛋白質動態解析
3. 学会等名 兵庫県MI研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ai Niitsu, Andrew R Thomson, Alistair Scott, Jason T Sengel, Kozhinjampara R Mahendran, Yuji Sugita, R Leo Brady, Mark I Wallace, Hagan Bayley, and Derek N Woolfson
2. 発表標題 De novo design of membrane coiled-coil barrels
3. 学会等名 Alpbach Workshop: Coiled coils, fibrous & repeat proteins（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ai Niitsu, Jaewoon Jung, and Yuji Sugita
2. 発表標題 Stability and dynamics of de novo designed transmembrane peptide barrels
3. 学会等名 第60回日本生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 尾嶋拓, 杉田有治
2. 発表標題 Development of the free-energy perturbation method toward drug discovery on supercomputer Fugaku
3. 学会等名 第60回日本生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 信夫愛、李秀栄、杉田有治
2. 発表標題 Binding free energy landscapes of Src Kinase to its inhibitors sampled by two-dimensional replica exchange molecular dynamics simulations
3. 学会等名 第60回日本生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森貴治
2. 発表標題 Structure modeling of protein complex from experimental data using molecular dynamics simulation
3. 学会等名 第60回日本生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi
2. 発表標題 Development of QM/MM methods and applications to chemical reactions of biomolecules
3. 学会等名 Tokyo Metropolitan University, Mini workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi
2. 発表標題 Searching for the Structure of a Capped Pentapeptide, SIVSF, Using a Similarity Score of Infrared Spectra
3. 学会等名 3rd International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 尾嶋拓, 杉田有治
2. 発表標題 Free Energy Perturbation Method in GENESIS
3. 学会等名 CBI学会2022年大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 非調和性を考慮した振動スペクトル計算法の開発と応用
3. 学会等名 日本分光学会年次講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mao Oide
2. 発表標題 MD-based inference of conformational ensemble from cryo-EM particle images
3. 学会等名 第9回「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大出真央
2. 発表標題 拡張アンサンブル法による生態分子動態の解析
3. 学会等名 第9回「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi
2. 発表標題 Anharmonic Vibrational Analyses of Bacteriorhodopsin by QM/MM Calculations
3. 学会等名 19th International Conference on Retinal Protein (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 細胞内環境の生物物理学
3. 学会等名 東京大学理学部物理コロキウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 新型コロナウイルススパイクタンパク質の糖鎖による構造安定性
3. 学会等名 第19回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Computational studies of conformational dynamics of membrane transporters and pumps
3. 学会等名 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 Cheng Tan
2. 発表標題 Multi-Scale Molecular Dynamics Simulations to Study Repulsive Interactions in Regulating Biomolecular Condensation
3. 学会等名 The 32nd Tokyo RNA Club (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 尾嶋拓, 杉田有治
2. 発表標題 静電相互作用の計算コストを抑えた自由エネルギー摂動法の開発
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Cheng Tan
2. 発表標題 Implementation of residue level coarse-grained models in GENESIS for large-scale molecular dynamics simulations
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Cheng Tan
2. 発表標題 Secondary structure and phase behavior of Hero proteins and their function in regulating biomolecular condensatio
3. 学会等名 2nd BIE workshop
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Protein Dynamics and Functions using enhanced MD simulations
3. 学会等名 The 23rd Sanibel Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ai Shinobu, Suyong Re, Yuji Sugita
2. 発表標題 Binding free energy landscape of c-Src kinase to its inhibitors sampled by molecular dynamics simulations: effect of ligand size and flexibility
3. 学会等名 BPS2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yutaka Ito
2. 発表標題 Protein structure determination by NMR: conformational multiplicity and the effects of macromolecular crowding
3. 学会等名 The 7th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yutaka Ito
2. 発表標題 Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living cells
3. 学会等名 The Protein Society Webinar “Exploring Proteins in Living Cells” (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 伊藤 隆
2. 発表標題 常磁性ランタノイド金属を用いた蛋白質の溶液NMRおよびin-cell NMR解析
3. 学会等名 第1回生命金属科学シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yutaka Ito
2. 発表標題 Protein behaviours under intracellular crowding environments
3. 学会等名 TMU Workshop on Protein NMR (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 永江 峰幸, 飯塚 佑介, 青山 洋史, 宮ノ入 洋平, 神野 智司, 伊藤 隆, 広瀬 侑, 三島 正規
2. 発表標題 シアノバクテリアの光センサーにおける脱プロトン化した塩基性アミノ酸の観測
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木 宏昌, 葛西 卓磨, Elisa Rioual, 池谷 鉄兵, 木川 隆則
2. 発表標題 NMR解析を用いた解糖系酵素PGKの環境適応的の活性制御による解糖系調節機構
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Sayeesh, PM, Teppei Ikeya, Haruka Sugasawa, Riki Watanabe, Yutaka Ito
2. 発表標題 NMR studies of a Drosophila adapter protein, Drk
3. 学会等名 第1回生命金属科学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 屋部 祥大, 田岸 亮馬, 鴨志田 一, 美川 務, 猪股 晃介, 池谷 鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 In-cell NMRによるlinear diubiquitinのin-situ立体構造解析
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 豊田 芽生, 猪股 晃介, 末広 志織, 島 海翔, 池谷 鉄兵, 鈴木 隆史, 山本 雅之, 伊藤 隆
2. 発表標題 In-cell NMR によるKeap1/Nrf2系の研究
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大久保 里佳, 池谷 鉄兵, 渡邊 吏輝, 菱倉 直樹, 三島 正規, 猪股 晃介, 小手石 泰康, 澤井 仁美, 城 宣嗣, 伊藤 隆
2. 発表標題 常磁性 NMR を用いた根粒菌マルチドメイン蛋白質FixJの立体構造解析
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館野 桂太, 菅澤 はるか, 安藤 考史, 田端 真彩子, 美川 務, 猪股 晃介, 甲斐荘 正恒, 三島 正規, 杉田 有治, 池谷 鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 マルチドメイン蛋白質GRB2とSOS1-PRM領域の相互作用解析
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安藤 考史, 菅澤 はるか, 館野 桂太, 田端 真彩子, 美川 務, 宮野入 洋平, 川端 庸平, Hisham Dokainish, Weitong Ren, 大出 真央, 寺内 勉, 猪股 晃介, 三島 正規, 甲斐荘 正恒, 杉田 有治, 池谷 鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 常磁性NMRを用いたマルチドメイン蛋白質GRB2の立体構造解析
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 富樫 直之, 宮田 裕貴, 亀井 駿, 菅澤 はるか, 美川 務, 猪股 晃介, 田仲 加代子, 伊藤 隆, 池谷 鉄兵
2. 発表標題 GMPPNP結合型K-RasG12VとRgI2RBDの相互作用解析
3. 学会等名 第61回NMR討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 優乙石, 山崎竜人, Feig Michael, 杉田有治
2. 発表標題 Stability and interaction of macromolecules altered by nucleoside triphosphates in cellular crowding
3. 学会等名 第60回生物物理学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 優乙石, 杉田有治
2. 発表標題 Microscopic Investigation on the Protein Aggregation Inhibition by ATP in Cell
3. 学会等名 第9回HPCIシステム利用研究課題 成果報告会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Multi-scale simulations of large biological systems on Fugaku
3. 学会等名 R-CCS symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Reduced efficacy of a Src kinase inhibitor in crowded protein solution
3. 学会等名 Prof. Sihyun Ham Memorial Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 高速QM/MM計算の開発と 生体分子ダイナミクスへの応用
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 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jaewoon Jung, Chigusa Kobayashi, Yuji Sugita
2. 発表標題 Development of GENESIS MD software on Fugaku supercomputer for understanding large scale biomolecular phenomena in cellular environments
3. 学会等名 Pacifichem symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi, Yuji Sugita
2. 発表標題 Finding the reaction path of metalloenzyme using QM/MM in GENESIS
3. 学会等名 Pacifichem symposium (#83) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kiyoshi Yagi
2. 発表標題 Anharmonic vibrational calculations of hydrogen bond network in protein using vibrational quasi-degenerate perturbation theory with localized coordinates
3. 学会等名 Pacifichem symposium (#410) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 How macromolecular crowding environments affect protein-ligand binding kinetics and thermodynamics
3. 学会等名 Pacifichem symposium (#200) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Molecular mechanisms for conformational changes and chemical reactions in the Ca ²⁺ -ATPase
3. 学会等名 Pacifichem symposium (#206) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jaewoon Jung, 笠原健人, 小林千草, 尾嶋拓, 森貴治, 杉田有治
2. 発表標題 Optimized hydrogen mass repartitioning scheme combined with accurate temperature/pressure evaluations for thermodynamic and kinetic properties of biological systems
3. 学会等名 第 35 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大出真央, 杉田有治
2. 発表標題 Capturing drastic state transitions of biological macromolecules by molecular dynamics simulation and nonlinear dimensionality reduction
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hisham Dokainish
2. 発表標題 Extensive Sampling of Spike protein down, one-up, one-open, and two-up-like Conformations and Transitions in SARS-Cov-2
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森貴治、寺師玄記、松岳大輔、木原大亮、杉田有治
2. 発表標題 Cryo-EM flexible fitting refinement with automatic error fixing for de novo protein structure modeling
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Mechanisms for conformational changes of proteins upon ligand bindings
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 Yuji Sugita
2. 発表標題 Parallel computing algorithms in molecular dynamics simulations for extremely large-scale biological systems
3. 学会等名 HITS Colloquium（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 Weight average法による振動スペクトル計算と生体分子への応用
3. 学会等名 第2回分子集合系計算科学セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Mechanisms for conformational changes of proteins upon ligand bindings
3. 学会等名 Polish-Korean Protein Folding Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 QM/MM法の開発と生体分子の化学反応解析
3. 学会等名 化学反応経路探索のニューフロンティア2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Enhanced Sampling Techniques
3. 学会等名 CECAM CHARMM-GUI Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Procedures to obtain reliable free-energy profiles of conformational changes in membrane transporters
3. 学会等名 ACS Fall 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 量子化学と分子動力学の融合が拓く高分子の分子機能解析
3. 学会等名 第1回溶液化学夏季講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 分子力学シミュレーションによる蛋白質の動的構造と基質結合：分子混雑環境の影響とSARS-CoV-2スパイク蛋白質に関する計算
3. 学会等名 構造活性フォーラム2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 八木清、杉田有治
2. 発表標題 分子力学計算プログラムGENESISにおけるQM/MM法の開発と応用
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 Yuji Sugita
2. 発表標題 Conformational flexibility and stability of SARS-CoV-2 spike protein in solution
3. 学会等名 ACS Spring 2021（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yutaka Ito, Kohsuke Inomata, Teppei Ikeya
2. 発表標題 Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells
3. 学会等名 22nd International Society of Magnetic Resonance Conference (ISMAR) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池谷 鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 複数の異なる NMR データの統合解析によるタンパク質 multi-state 立体構造解析
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 Teppei Ikeya, Mayu Okada, Yutaka Tateishi, Eri Nojiri, Tsutomu Mikawa, Sundaresan Rajesh, Hiroki Ogasa, Takumi Ueda, Hiromasa Yagi, Toshiyuki Kohno, Takanori Kigawa, Ichio Shimada, Peter Guentert, Yutaka Ito
2. 発表標題 Multi-state structure determination and dynamics analysis reveals a new ubiquitin-recognition mechanism in yeast ubiquitin C-terminal hydrolase
3. 学会等名 22nd International Society of Magnetic Resonance Conference (ISMAR) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Sayeesh. P. M., Teppei Ikeya, Haruka Sugasawa, Riki Watanabe, Yutaka Ito
2. 発表標題 Insight into the C-terminal SH3 mediated binding of Drosophila Drk towards Sos and Dos
3. 学会等名 22nd International Society of Magnetic Resonance Conference (ISMAR) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiromasa Yagi, Takuma Kasai, Elisa Rioual, Teppei Ikeya, Taganori Kigawa
2. 発表標題 Molecular mechanism of glycolytic flux control intrinsic to human phosphoglycerate kinase
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Sayeesh. P. M., Teppei Ikeya, Haruka Sugasawa, Riki Watanabe, Yutaka Ito
2. 発表標題 Insight into the C-terminal SH3 mediated binding of Drosophila Drk towards Sos and Dos
3. 学会等名 第44回日本分子生物学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 富樫直之, 亀井駿, 菅澤はるか, 猪股晃介, 伊藤隆, 田仲加代子, 池谷鉄兵
2. 発表標題 NMRによるKRASとRGL2の相互作用解析
3. 学会等名 第44回日本分子生物学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 屋部 祥大, 田岸亮馬, 鴨志田一, 美川務, 猪股晃介, 池谷鉄兵, 伊藤隆
2. 発表標題 直鎖状ユビキチン二量体の溶液構造解析
3. 学会等名 第44回日本分子生物学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 末広志織, 猪股晃介, 豊田芽生, 池谷鉄兵, 鈴木隆史, 山本 雅之, 伊藤隆
2. 発表標題 In-cell NMRを用いたKeap1-Nrf2制御系の解析
3. 学会等名 第44回日本分子生物学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 優乙石, 杉田有治
2. 発表標題 Development of Trajectory Analyzer for Cellular-Scale Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 優乙石, Po-hung Wang, 杉田有治
2. 発表標題 In situ Analysis of Protein Dynamics with All atom Cytoplasm Simulations
3. 学会等名 第8回HPCIシステム利用研究課題 成果報告会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 富岳を用いた新型コロナウイルス 表面のスパイクタンパク質動的構造予測
3. 学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学部会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 新型コロナウイルス 表面のタンパク質動的構造予測
3. 学会等名 HPCIフォーラム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Intrinsic Conformational Flexibility of SARS-CoV-2 Spike-Protein Simulated on Fugaku
3. 学会等名 The 3rd R-CCS International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Multi-scale MD simulations using GENESIS on Fugaku
3. 学会等名 The 1st Fugaku Bio-supercomputing Workshop on Cellular-Scale Molecular Dynamics Simulations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 スーパーコンピュータが明らかにする蛋白質の動的構造と機能
3. 学会等名 理研・東北大学連携シンポジウム「計測科学が拓く生命科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 八木 清
2. 発表標題 大規模QM/MM計算が拓く生命科学のフロンティア
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 Jaewoon Jung
2. 発表標題 Development of GENESIS on Fugaku supercomputer and its application of Spike protein on the surface of SARS-CoV-2 in solution
3. 学会等名 HPCIC計算科学フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 計算機シミュレーションで細胞の中を観る
3. 学会等名 京都大学MACSコロキウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 細胞環境はどのようにタンパク質の構造・ダイナミクス・機能に影響を与えるか？
3. 学会等名 CBI学会2020年大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 All-atom molecular dynamics simulations of spike protein on the surface of SARS-CoV-2 in solution
3. 学会等名 RIKEN-NRC HPC Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉田 有治
2. 発表標題 新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測
3. 学会等名 第9回JCAHPCセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田村康一
2. 発表標題 Theoretical Study on the Transport Cycle of the Heme ABC Transporter BhuUV-T
3. 学会等名 第58回生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ai Niitsu
2. 発表標題 Rational design of membrane-spanning alpha-helical peptide barrels
3. 学会等名 第58回生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 Multi-state protein structure determination by integrated analysis of several NMR data sets
3. 学会等名 第58回生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 八木清
2. 発表標題 計算化学と振動分光の融合による高分子内分子動態解析法の開発と応用
3. 学会等名 第69回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Use of enhanced conformational sampling for the analysis of protein-ligand binding processes
3. 学会等名 Telluride Summer Research Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiraku Oshima
2. 発表標題 Developments and applications of generalized-ensemble methods for free-energy analysis of protein-ligand binding
3. 学会等名 第20回日本蛋白質科学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 三島正規
2. 発表標題 NMR studies on the protonation state of cyanobacteriochrome
3. 学会等名 第59回NMR討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡邊吏輝, プパティ マキシシ ヌサイーシュ, 末元雄介, 木川隆則, 三島正規, 猪股晃介, 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 NMRを用いたアダプター蛋白質Drkの動態解析
3. 学会等名 第59回NMR討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田端真彩子, 池谷鉄兵, 美川 務, 川端庸平, 安藤考史, 館野桂太, 三島正規, 伊藤 隆
2. 発表標題 PRE, PCSを用いたマルチドメイン蛋白質GRB2の立体構造解析
3. 学会等名 第59回NMR討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 尾嶋拓
2. 発表標題 タンパク質 リガンド結合の自由エネルギー計算法の開発と応用
3. 学会等名 CBI学会2020年大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森貴治
2. 発表標題 高速クライオ電顕フィッティング法の開発と応用
3. 学会等名 CBI学会2020年大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 優乙石, Michael Feig, 杉田有治
2. 発表標題 Reduced protein-protein interactions in the cellular crowding with binding of nucleoside triphosphates
3. 学会等名 第58回生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-Energy Landscape of Protein-Ligand Binding by generalized REST
3. 学会等名 257th ACS national meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉田有治, 李秀栄
2. 発表標題 スパコン「京」とGENESISを用いた創薬自由エネルギー計算
3. 学会等名 第4回理研-製薬協連携フォーラム「創薬専用MDシミュレーターの産学共同開発」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Simulations of Biomolecules in Cellular Crowded Environments
3. 学会等名 Albany 2019. the 20th Conversation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-Energy Calculations of Protein-Ligand Binding in Solution and in Cellular Environments
3. 学会等名 Free Energy Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Protein-protein and protein-ligand interaction in cellular environments
3. 学会等名 PSSJ 19th Annual Symposium (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Slow-down of protein and metabolite diffusion in crowded protein solution", TSRC workshop on macromolecular crowding
3. 学会等名 Telluride Summer Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-Energy Calculations of Protein-Ligand Binding by Enhanced Sampling Methods
3. 学会等名 The 10th Toyota RIKEN International Workshop on Science of Life Phenomena Woven by Water and Biomolecules (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Machine learning approach to link MD simulation with single-molecule experiment for understanding protein folding and dynamics
3. 学会等名 The 5th Korean-Polish Conference on "Protein Folding: Theoretical and Experimental Approaches (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Enhanced Conformational Sampling Methods for Free Energy Calculation
3. 学会等名 CHARMM-GUI Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉田有治
2. 発表標題 分子動力学で見る細胞質内での分子の動き
3. 学会等名 Chemical Probe第二回合同合宿セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Large-scale molecular dynamics simulation of biomolecules in cellular environments
3. 学会等名 Accelerated Data Analytics and Computing Workshop 8 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-Energy Calculations of Protein-Ligand Binding using GENESIS software
3. 学会等名 ICMS2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Molecular Dynamics and Interaction of Protein-Ligand Binding in Crowded Cellular Environments
3. 学会等名 the 42th Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Sugita
2. 発表標題 Free-Energy Calculations of Protein-Ligand Binding using GENESIS
3. 学会等名 Supercomputer Symposium at IMS (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yutaka Ito, Teppei Ikeya
2. 発表標題 Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells
3. 学会等名 33rd Annual Symposium of the Protein Society, USA (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 High resolution protein 3D structure determination in living eukaryotic cells
3. 学会等名 The 8th Asia Pacific NMR Symposium, Singapore (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Teppei Ikeya, Yutaka Ito
2. 発表標題 Multi-state protein structure determination by integrated analysis of several NMR data sets
3. 学会等名 IPR seminar (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takashi Tanaka, Yutaka Ito, et al.
2. 発表標題 High-resolution protein 3D structure determination in living eukaryotic cells
3. 学会等名 The 12th Australian and New Zealand Society for Magnetic Resonance Conference (ANZMAG conference 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池谷鉄兵, 伊藤 隆
2. 発表標題 MDシミュレーション vs NMR立体構造計算(multi-state立体構造計算)
3. 学会等名 第20回若手NMR研究会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊藤 隆, 池谷鉄兵
2. 発表標題 溶液NMRを用いたin situ構造生物学
3. 学会等名 第13回バイオ関連化学シンポジウム2019(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池谷鉄兵, 伊藤 隆, 他
2. 発表標題 常磁性効果による遠距離構造情報を利用したタンパク質multi-state立体構造解析
3. 学会等名 第58回NMR討論会(2019)(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yutaka Ito, Teppei Ikeya
2. 発表標題 Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells
3. 学会等名 The 42th Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊藤 隆
2. 発表標題 高度細胞機能を解析する分子動態計測と情報科学との融合
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池谷鉄兵, 伊藤 隆, 他
2. 発表標題 生細胞内のタンパク質立体構造解析
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Isseki Yu
2. 発表標題 All-atom molecular dynamics simulation of the altered protein-protein interaction with metabolites and ions in the cytoplasm.
3. 学会等名 Biophysical Society 64th Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Isseki Yu
2. 発表標題 All-atom molecular dynamics simulation of the reduced protein-protein interaction with metabolites in the cytoplasm.
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 優 乙石
2. 発表標題 細胞質中の代謝物によって改変される蛋白質間相互作用の全原子分子動力学シミュレーション
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

〔図書〕 計4件

1. 著者名 Yuji Sugita, Michael Feig	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Royal Society of Chemistry	5. 総ページ数 305
3. 書名 In-cell NMR Spectroscopy: From Molecular Sciences to Cell Biology	

1. 著者名 Yuji Sugita, Motoshi Kamiya, Hiraku Oshima, Suyong Re	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 578
3. 書名 Biomolecular Simulation: Methods and Protocols	

1. 著者名 Teppei Ikeya, Peter Guntert, Yutaka Ito	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Royal Society of Chemistry	5. 総ページ数 305
3. 書名 In-cell NMR Spectroscopy: From Molecular Sciences to Cell Biology	

1. 著者名 田中 啓二、若槻 壮市	4. 発行年 2020年
2. 出版社 羊土社	5. 総ページ数 248
3. 書名 イメージング時代の構造生命科学	

〔産業財産権〕

〔その他〕

理化学研究所開拓研究本部杉田理論分子科学研究室 https://tms.riken.jp/ 東京都立大学化学科有機構造生物化学研究室 https://www.comp.tmu.ac.jp/osbc/Group_Ito/index.html

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	伊藤 隆 (Ito Yutaka) (80261147)	東京都立大学・理学研究科・教授 (22604)	
研究分担者	優 乙石 (Yu Isseki) (90402544)	前橋工科大学・工学部・准教授 (22303)	

	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	八木 清 (Yagi Kiyoshi) (30401128)	理化学研究所・開拓研究本部・専任研究員 (82401)	

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	大出 真央 (Oide Mao) (20880298)	理化学研究所・開拓研究本部・特別研究員 (82401)	現所属：大阪大学蛋白質研究所・助教
研究協力者	池谷 鉄兵 (Ikeya Teppei) (30457840)	東京都立大学・理学研究科・准教授 (22604)	
研究協力者	ジョン ジェウーン (Jung Jaewoon) (10554701)	理化学研究所・開拓研究本部・専任技師 (82401)	
研究協力者	タン チェン (Tan Cheng) (20865886)	理化学研究所・計算科学研究センター・特別研究員 (82401)	現所属：理化学研究所計算科学研究センター・研究員
研究協力者	伊東 真吾 (Ito Shingo) (82401)	理化学研究所・開拓研究本部・特別研究員 (82401)	現所属：理化学研究所計算科学研究センター・研究員
研究協力者	レイ ヤオクン (Lei Yaokun) (82401)	理化学研究所・開拓研究本部・特別研究員 (82401)	現所属：理化学研究所iTHEMS・特別研究員

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

米国	Michigan State University			
英国	University of Cambridge	University of Leicester		
ドイツ	Goethe University Frankfurt			
スイス	ETH Zurich			
ポーランド	University of Warsaw			