



"Dynamical Ordering & Integrated Functions"

Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：大環状芳香族分子が室温で示すスピナルバーブ機能

"Room Temperature Magnetoresistance in an Organic Spin Valve with an Aromatic Hydrocarbon Macrocycle"

K. Z. Suzuki, T. Izumi, X. Zhang, A. Sugihara, S.-T. Pham, H. Taka, S. Sato, H. Isobe, and S. Mizukami

APL Mater., 5, 046101, (2017), DOI:10.1063/1.4979548

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科
・A02 計画研究代表者)



ベンゼンやナフタレンといった、ごく単純な芳香族化合物を環状に連結することで、単位ユニットとなる芳香族分子の性質を保ちながらも不揮発性の固体へと変換できる。それゆえ、OLED やリチウムイオン電池といった素子へと応用できることを見いだしてきており、精密に構造制御された特異な分子構造、動的な秩序構造に由来する物性の活用例を示してきている。

今回、新たな取り組みとして、有機スピントロニクス素子への応用をめざし、その一例として有機スピナルバーブ素子への応用をねらった。有機スピナルバーブ素子とは、薄膜状の有機材料を、2 つの強磁性電極で挟んだ構造をもつ。この両強磁性層の磁化の向きの相対角に応じて、素子の電気抵抗率が変化する現象（磁気抵抗効果）が観測される。2004 年に、有機材料に対して、低温で 40% に達する磁気抵抗率の変化が報告され、一躍、有機材料への関心が高まってきた。より実用的には、室温で機能する材料の開発が求められている。

磁気抵抗効果を示す材料として検討した分子は、6 分子のナフタレンを 2,7-位で環状に連結した [6]cyclo-2,7-naphthylene ([6]CNAP, 図 1) であり、蒸着法によって様々な厚みの [6]CNAP を、Co/AI_xO_y 電極と Ni₈₀Fe₂₀ 電極の間に挟み（図 2）、5~300 K の温度範囲で磁場を掃引しながら電気抵抗値を測定した。その結果、15 nm 厚の [6]CNAP 薄膜に対して、5 K では 4~6% の磁気抵抗率の変化が観測され、また、興味深いことに室温付近の 300 K においても 1~2% の磁気抵抗率の変化が有意に観測された（図 3）。

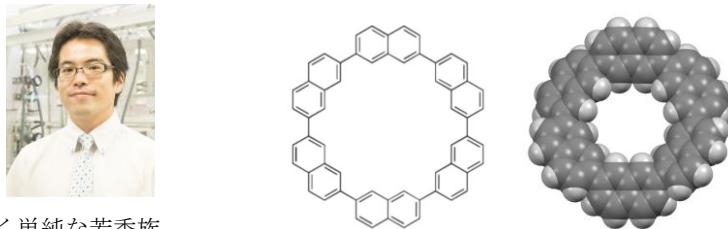


図 1：材料として用いた[6]CNAP の分子構造。

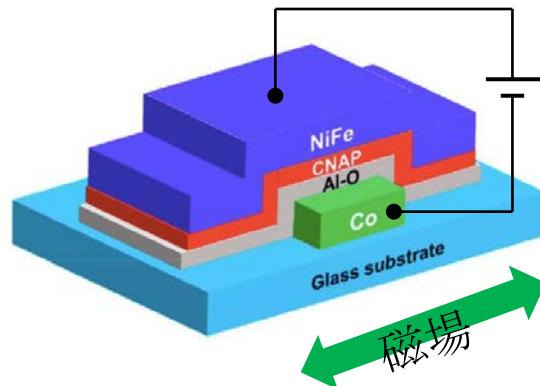


図 2：スピナルバーブ機能の評価に使った素子構成。電極間の電気抵抗を測定すると共に、外部から磁場を加えることで、2 つの強磁性層の磁化の向きを制御できる。

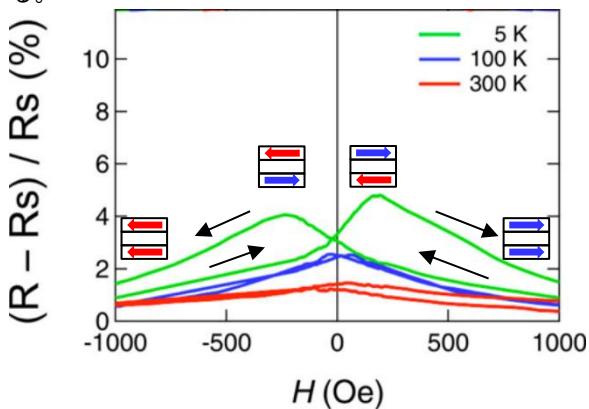


図 3: 15 nm 厚の [6]CNAP 薄膜に対して観測された磁気抵抗率。2 つの強磁性層の磁化の向きを赤/青→で模式的に示す。中央の層が [6]CNAP の薄膜である。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：重ねたお椀状に会合する湾曲した穴あき巨大グラフェン

"Synthesis and Bowl-in-Bowl Assembly of a Geodesic Phenylene Bowl"

K. Ikemoto, R. Kobayashi, S. Sato, and H. Isobe

Angew. Chem. Int. Ed., **56**, 6511-6514, (2017), DOI:10.1002/anie.201702063

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科
・A02 計画研究代表者)



大きな芳香族分子が示す、特異な構造に基づく独特な物性発現に興味をもって研究を進めてきている。平面ではなく湾曲させることで、これまでに知られていない新しい物質群をうみだすことができると考え、分子設計を行ってきている。メタ位を使って n 個のベンゼン環を互いに連結し、環状の化合物 ($[n]$ シクロメタフェニレン) を構築すると、[5]CMP は分子内の歪みによって湾曲することがわかってきており、また、[5]CMP や [6]CMP は原子欠損したグラフェン分子の構造をもつ。

今回、[5]CMP を核として、縁の部分に相当するメタ位を使って 5 つの [6]CMP 構造を融合させた分子(図 1a)を設計し、カップリング反応を駆使して合成を達成した。分子式は $C_{160}H_{150}$ 、分子量 2072.96、直径 3 nm を超える巨大な分子ではあるが、精緻に構造が決まった単分子であるために、各種分光法による厳密な構造決定が可能である。当初、 1H NMR スペクトルにマイナーな不純物の信号が観測され、異なる精製法を用いても除去できない問題があった。濃度や温度といった条件を変えて測定し、また、 1H NMR スペクトルを y 軸方向に拡散係数に従って展開する DOSY NMR 法によって分子の大きさを見積もったところ、モノマーとダイマーとの平衡があることを見いだした。加熱するとダイマーが増加し、エンタルピー的には好ましくないものの、エントロピー的に好ましい過程であることを実験的に見いだした。

この分子の単結晶の調製にも成功した。結晶性が悪い薄い板状晶であり、多数の溶媒分子が隙間に入り込

むために、少し触るだけで割れてしまい、溶媒の揮発によって潮解して結晶性が失われた。さらに、炭素と水素だけという軽元素しか含まないために、回折点の信号強度が弱いにも関わらず、X 線損傷にも弱く、取り扱いが難しい試料であった。実験室に備えた X 線回折装置では手に負えるはずもなく、最終的に、挿入光源型の輝度が高い放射光 X 線を用い、高感度かつノイズレスな PAD 検出器を用いた回折実験によって構造解析を達成した(図 1, KEK PF BL17A)。お椀のように湾曲し、6箇所の原子欠損による穴をもつ特徴ある構造が明らかとなり、お椀を重ねたダイマー構造の様子を精密に明らかにすることができた。

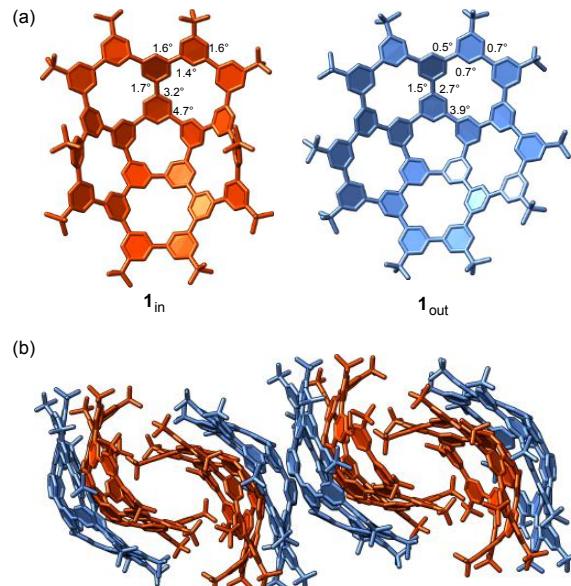


図 1：放射光 X 線結晶構造解析によって明らかになった、巨大お椀状ナノカーボン分子の構造。(a) 非対称要素の構造。(b) パッキング構造。

なお、本研究は掲載誌の VIP 論文に選ばれ、Inside Back Cover を飾り、Highlights 欄で紹介された(DOI: 10.1002/anie.201704621)。また、雑誌「化学」2017 年 7 月号で、解説記事とともに表紙を飾った。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：グラフェンの原子欠損した穴がフラーレンをキャッチ

"Entropy-Driven Ball-in-Bowl Assembly of Fullerene and Geodesic Phenylene Bowl"

K. Ikemoto, R. Kobayashi, S. Sato, and H. Isobe

Org. Lett., 19, 2362-2365, (2017), DOI:10.1021/acs.orglett.7b00899

佐藤宗太
(東京大学理学系研究科
・A02 計画研究代表者)



前ページで紹介したように、複数の原子欠損箇所をもつ湾曲したグラフェン分子の合成に成功した。sp²炭素を基盤としたナノカーボン用いた超分子会合体の形成は興味をもたれており、電子顕微鏡によって、フラーレンの凸面がカーボンナノホーンの先端の凹面と相互作用している様子が観測されている。この認識は、ファンデルワールス力だけで構成されていると考えられ、また、ナノホーンの先端は穴があいているとも考えられているが、ナノカーボン材料の構造が不均一であることから、分子レベルでの構造と分子認識との相関は探索されていない。

今回、穴のあいたグラフェン分子 **1** が、1 分子の C₆₀ フラーレンを認識した、超分子複合体が得られることを見いだした（図 1a）。分子 **1** の重クロロホルム溶液に、C₆₀ を加えたところ、**1** の ¹H NMR 信号が高磁場側にシフトした。Job plot 解析から 1:1 会合体の形成がわかり、また温度可変 NMR 測定から、溶液中における熱力学を明らかにした。会合定数は $K_a = 10^4 \text{ M}^{-1}$ を超え、非常に強固な会合であることがわかり、また、分子 **1** の自己会合によるダイマー形成と同様に、エントロピー駆動による会合であることを見いだした。

1:1 会合体に対して、クロロホルム/メタノールの溶媒系を用いて単結晶を得た。前ページで紹介した、分子 **1** のダイマーの単結晶構造解析と類似の複数の問題点があり、実験室に設置した単結晶 X 線回折装置では構造解析に値する良質なデータを得ることはできなかつた。最終的に、KEK PF BL17A ビームラインにおいて、強輝度な集光 X 線を用いて統計精度の高い

データを得られた。なお、分子 **1** や、**1** と C₆₀ との会合体の結晶データは、有機結晶のためのケンブリッジ結晶構造データベースに登録する際に、分解能不足の警告が出た。「通常」有機分子ではなく、巨大な分子構造をもつために、この警告は避けがたく、これらのデータと共に原著論文として採択された。

会合した分子構造は、C₆₀ のディスオーダーの様子を含め、構造決定できた（図 1b）。原子欠損部位である凹んだ中央部が C₆₀ フラーレンを捕らえている様相が明らかとなり、ナノカーボンの超分子会合体の化学に新しい知見をもたらした。

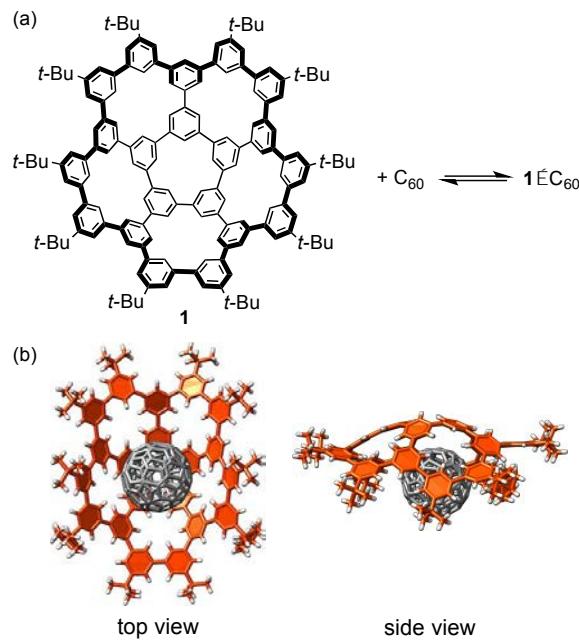


図 1 : (a) お椀型の分子が C₆₀ を分子認識し、会合体を形成。(b) 放射光 X 線によって明らかになった結晶構造。中央部の凹面でフラーレンを捕まえる。

なお、本研究は Angew. Chem. Int. Ed. 誌の Highlights 欄で紹介された（DOI: 10.1002/anie.201704621）。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：高い蛍光量子収率を示す大環状芳香族分子

"[n]Cyclo-3,6-Phenanthrenylenes: Synthesis, Structure and Fluorescence"

Y. Tian, K. Ikemoto, S. Sato, and H. Isobe

Chem. Asian J., 12, in press, (2017), DOI:10.1002/asia.201700563

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科
・A02 計画研究代表者)



中心部に「穴」をもつ大環状芳香族分子に対して、その特異な分子構造に由来する独特な物性の発現をめざして研究を行ってきている。本領域のニュースレター2017年5月号で紹介したように、3分子のフェナントレンを、その3位と6位とを用いて互いに連結した、[3]cyclo-3,6-phenanthrenylene ([3]CPhen_{3,6}、図1)は、1965年に最初の合成が報告されたものの、光学物性は明らかにされていなかった。この分子は青色に蛍光発光し、その量子収率は75%と高く、OLEDの発光材料として用いると、ほぼ理論限界に達する高い効率を示す有用な分子であることを見いだした。

今回、山本型のカップリング反応を用い、フェナントレンのユニット数nが異なる一連の大環状分子を一回の反応で同時に合成し、溶解度の差やクロマトグラフィーを用いて単離することができた。n=3である[3]CPhen_{3,6}の収率が35%と最も高く、[8]CPhen_{3,6}は0.3%と低い収率ながらも単離・構造決定に至った。[6]CPhen_{3,6}は、おそらく溶解度が非常に低いために単離するに至らなかった。

各分子の単結晶X線構造解析を行ったところ、[3]CPhen_{3,6}は平面型、[4]および[5]CPhen_{3,6}はサドル型、[7]および[8]CPhen_{3,6}はメビウス型の構造をとることがわかった(図2)。この構造的特徴は、溶液状態におけるUV-vis吸収のレッドシフトの程度に反映されることがわかった。いずれの分子も青色の蛍光発光を示し、[3], [5], [7]および[8]CPhen_{3,6}では、その量子効率は75~85%と高かった。一方、[4]CPhen_{3,6}の量子効率は32%と顕著に低かった。

今後、精密設計された分子構造と、明確に決定され

た分子構造、比較となる関連化合物が揃っている利点を活かし、大環状芳香族化合物の蛍光量子収率の秘密を解き明かしたい。

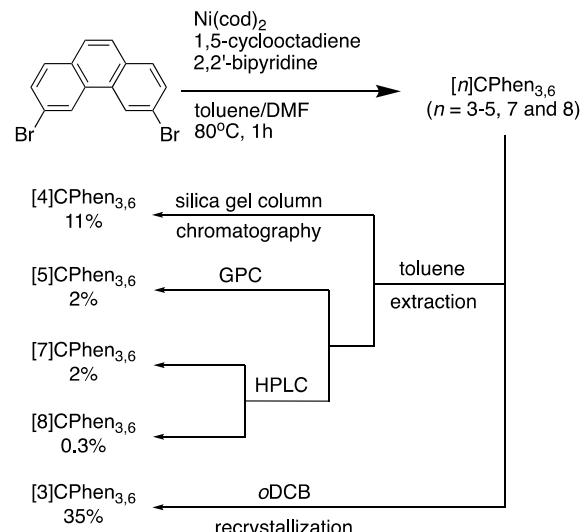


図1 : [n]CPhen_{3,6}の合成スキーム。

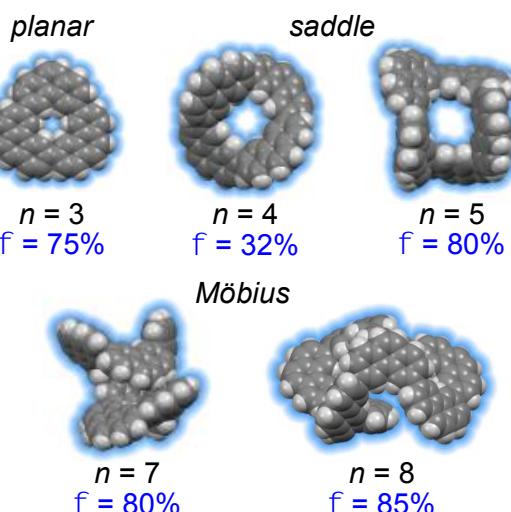


図2 : 単結晶X線構造解析によって明らかになった[n]CPhen_{3,6}の構造と、各分子の量子効率(ϕ)。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：5 角形を含む剛直なカーボンナノチューブ分子

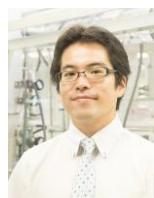
“Pentagon-Embedded Cycloarylene Molecules with Cylindrical Shapes”

S. Hitosugi, S. Sato, T. Matsuno, T. Koretsune, R. Arita, and H. Isobe

Angew. Chem. Int. Ed., **56**, in press, (2017), DOI:10.1002/anie.201704676

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科
・A02 計画研究代表者)



芳香族分子をユニットとして環状に連結し、中央部に穴をもつ大環状型の分子の合成を探求してきている。有機合成化学の手法によって精密に分子設計することで、分子レベルで sp^2 炭素ネットワークが定まり、長さまでもが制御されたカーボンナノチューブ分子をうみだすことができている。カーボンナノチューブの基本的な構造は sp^2 炭素が 6 角形に並んだ構造であり、分子においてはその部分構造が切り出されている。

5 角形や 7 角形の構造を取り入れてもカーボンナノチューブが形成できることが、ペンタヘプタイトやヘッケライト構造として提唱されてきているが、そのような分子の合成は報告例がない。今回、初めて sp^2 炭素が 5 角形に並んだ部分構造を有するカーボンナノチューブ分子の合成に成功し、単結晶 X 線構造解析を含め、その構造を明らかにすることことができた。

ルビセンは 2 つの 5 角形を含む芳香族分子であり、その 5 位と 12 位とをボリル化した化合物を合成し(図 1)、Pt(II)触媒を用いた環化反応を行った。生成物は剛直な構造にも関わらず十分な溶解度をもち、クロマトグラフィーによる単離精製の結果、環状 3 量体 ($[3]cyclo\text{-}5,12\text{-rubicene}$; [3]CR) が 0.2%、4 量体 ([4]CR) が 1.4% の収率で得られた。

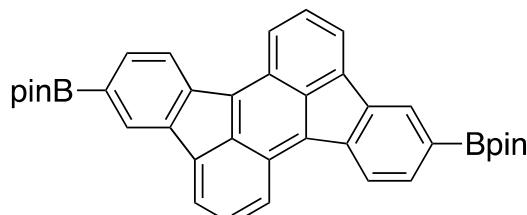


図 1 : 5,12-位 をボリル化したルビセンの構造。

[3]CR の結晶を得ることができ、実験室に備えられた回折計での測定を検討したところ、ある程度の質のデータが得られたものの、初期構造を解くことができなかった。収率が低く試料量が極めて限られるために、得られた結晶試料を迅速に測定する必要があり、あいちシンクロトロン BL2S1 ビームラインを初めて使用した。朝から夕方までの日中のみの運転時間しかなく、配送した実験器具が最寄りの配送センターでのトラブルで夕方まで届かないトラブルにも見舞われたが、他のビームラインスタッフの方にまで器具をお借りするなどして予備検討を進めさせてもらえ、なんとか最後の 2 時間弱で回折データを取得することができた。解析の結果、ラボ機のデータでは、おそらく発散角が大きいために回折点の分離が悪く、単位格子を正しく決定できなかったことがわかり、放射光 X 線の利用によって構造解析を達成できた。予想外の溶媒分子の構造が明確に決定され、結晶化溶媒の NMR 解析も併用して結晶化溶媒の取り違えであったことがわかった。この溶媒分子がうまく充填することで、結晶成長したと考えられる。[3]CR の構造は、分子設計した通りに、円筒形に π 平面が湾曲して環状 3 量化したことが明らかになった(図 2)。環化構造をとることで、平面性のルビセン単体と比較して芳香族性が低下し、キノイド構造の寄与が大きくなつたことを見いだした。

Top view



Side view

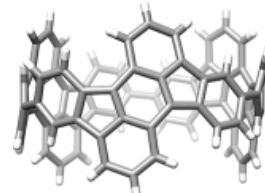


図 2 : 放射光 X 線を用いた単結晶構造解析で明らかになつた[3]CR の構造。



"Dynamical Ordering & Integrated Functions" Newsletter Vol. 47

July, 2017

業績紹介：酸素に不安定な鉄硫黄クラスターを用いて tRNAに硫黄を導入する酵素の構造機能解析

"Biochemical and Structural Characterization of Oxygen-sensitive 2-thiouridine Synthesis Catalyzed by an Iron-sulfur Protein TtuA"

Minghao Chen, Shin-ichi Asai, Shun Narai, Shusuke Nambu, Naoki Omura, Yuriko Sakaguchi,
Tsutomu Suzuki, Masao Ikeda-Saito, Kimitsuna Watanabe, Min Yao, Naoki Shigi, and Yoshikazu Tanaka
Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 114, 4954-4959, (2017), [10.1073/pnas.1615585114](https://doi.org/10.1073/pnas.1615585114)

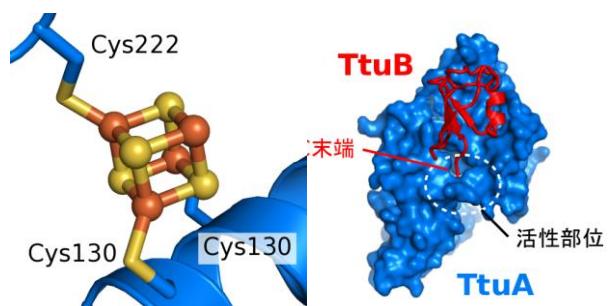
田中良和
(東北大学生命科学研究所・A03
公募研究代表者)



トランスファーRNA (tRNA) は DNA から転写されたままの状態では正しく機能することはできず、塩基修飾を受けて初めて機能できるようになる。tRNA の塩基修飾には、メチル化、水素化、アセチル化など、様々なもののが存在する。本研究では、一部の好熱古細菌の tRNA に存在し、高温環境下での tRNA の構造を安定化する硫黄修飾 (2-チオリボチミジン : s²T) を導入する酵素、TtuA-TtuB の反応機構を X 線結晶構造解析と生化学的解析により明らかにした。

s²T は、硫黄転移酵素 TtuA と硫黄運搬蛋白質 TtuB により tRNA に導入される。TtuB はエビキチン様の蛋白質で、その C 末端にチオカルボキシル基 (-COSH) として硫黄を結合して運搬し、これを TtuA が tRNA へと転移する。しかし、研究開始当初、TtuA-TtuB による硫黄転移反応を解析する上で、2 つの大きな問題があった。それは、TtuA が非常に沈殿しやすい蛋白質であることと、tRNA と試験管内で混合しても、硫黄転移反応が起こらないということである。反応溶液に少量の細胞抽出液を添加すると、わずかではあるが硫黄転移反応が観測されることから、何らかの補因子が必要であることは推察されていたが、それが何なのかは長きにわたり明らかにすることができずにいた。我々は、精製直後は薄い茶色を呈している TtuA が、時間が経つにつれ色がなくなり、その後、白濁沈殿することにヒントを得て、未知補因子が酸素に対して非常に不安定な鉄硫黄クラスターであることを突き止め

た。鉄硫黄クラスターを再構成した TtuA は、無酸素条件下では沈殿することなく、また十分な硫黄転移活性を示した。我々は、完全無酸素条件下で調製した鉄硫黄クラスターを含む TtuA の結晶構造を決定し、4Fe4S 型のクラスターが、活性部位に結合していることを明らかにした（図、左）。通常、4Fe4S 型の鉄硫黄クラスターは 4 つのシステインによりキレートされることが多いが、TtuA では 3 つのシステインによってキレートされており、これが TtuA の鉄硫黄クラスターが著しく不安定な原因であることがわかった。さらに我々は、TtuA-TtuB 複合体の結晶構造解析にも成功し、活性部位へと続く TtuA のトンネルに、TtuB が長く伸長した C 末端のループを挿入する形で、硫黄を供給することを明らかにした（図、右）。



図：(左) TtuA の活性部位に結合した鉄硫黄クラスター
(右) TtuA-TtuB 複合体の結晶構造



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

全体班会議印象記 1

内橋貴之

(名古屋大学理学研究科・
A01 公募研究代表者)



本年度の全体班会議は6月2日～5日に沖縄科学技術大学院大学(OIST)のOISTカンファレンスセンターで開催されました。OISTの素晴らしいキャンパスと美しい海を眺望できる最高の立地のなか、充実した時間を過ごすことが出来ました。



OIST から眺望する海

前半から本領域に加わっておられる班員の方々とはもう長い付き合いとなり、また、昨年から参加されている方々とも、国際シンポジウムを含めると今回で3回目ということで、多くの参加者と比較的気軽に交流することができました。また、これまでの4年以上にわたる領域活動の大きな成果として、各班内および班を跨いだ、まさに網の目のような共同研究ネットワークが構築されていることが印象的でした。自分が得意とする計測手法や理論を活かした研究、あるいは専門とされる生体試料を多彩な手法により様々な角度から解析するなど、多様な研究スタイルによる研究進展の話を聞けるのは新学術の全体班会議ならではです。

私が所属するA01班では、様々な実験手法や理論を駆使して、有機超分子から生体分子までの幅広い材料



A01班 岩田耕一先生によるご発表の様子

を対象に動的秩序の探索が行われています。生体分子に関する研究発表として、秋山修志先生(分子研)が結晶構造解析、広角X線散乱、高速AFMなどの計測手法を駆使したKai時計タンパク質の構造解析、養王田先生(東京農工大)がX線一分子追跡法、結晶構造解析、高速AFMを用いた分子シャペロンの構造機能解析、松村先生(立命館大、藤田さん(阪大)による代理発表)が細菌の細胞骨格タンパク質FtsZのX線結晶、シミュレーション、高速AFMによる構造解析について話をされました。私自身は高速AFMによるKaiタンパク質の複合体形成について話をさせていただきました。最新のNMRを利用した研究として、内藤先生(横浜国大)による固体NMRを用いたグルカゴンアミロイド纖維形成の分子機構と脂質膜分断効果、池谷先生(首都大学東京)によるIn-cell NMRと細胞内分子クラウディングなど、計測技術開発とそれを活かした研究に関する発表がありました。また、脂質膜に関して、岩田先生(学習院大)からピコ秒ラマンや蛍光分光を用いた脂質膜の粘度の分布、松森先生(九州大)はラフト蛍光マーカーの開発とラフト形成の計測について発表されていました。超分子の実験では高田先生(東工大、青木先生による代理発表)の高分子ゲルのロタキサン架橋と物性評価の話がありました。理論では、立川先生(横浜市大)のA03班平岡先生との共同研究によるカゴ型超分子錯体の安定性に関する考察、秋山良先生(九大)



カンファレンスセンターで講演に聞き入る聴衆の様子



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

の固体表面における粒子選択性と朝倉大澤理論の有効性、東先生（琉球大）の光捕集複合体の自己組織化と光集積のシミュレーション解析など、理論・シミュレーションの幅広い研究発表がありました。

今回はこれまでにない企画として、OISTの概要説明と4つの研究室の研究紹介、その後に研究室見学が実施されました。OISTの日本の大学とは思えないほどの充実かつスタイリッシュな施設とインターナショナルな雰囲気に驚愕しました。大学入口にある研究紹介を兼ねたトンネルギャラリーからして、もう普通の大学でないことが十分わかります。見学中は周囲の人とすごすぎる設備の話で随分盛り上りました。こんな環境で研究できるとは羨ましい思いを禁じえません。



OIST 入り口のトンネルギャラリー

4つの研究室の中から私は銅谷先生の神経計算ユニットを見学させていただきました。光遺伝学を利用してセロトニン神経活動とマウスの辛抱強さを調べた研究について、研究員の方が素人にも大変分かり易い説明をされ、普段の自身の活動範囲でなかなか聞けない内容もあり、非常に興味深く聞くことが出来まし

た。アリのX線マイクロCT撮影なんかをしているOISTらしい？研究をしているラボもあったようで、そちらも是非見学してみたかった！

昼間の班会議のあとは恒例の夜の部ですが、今回も毎晩夕食後に盛大に交流会が行われました。毎回のことながら本領域の参加者は皆さん体力があり、深夜まで活発な議論で盛り上りました。交流会で他大学の先生が連れてきた学生さんや若い研究者、大御所の先生方と気軽に話ができるることは、いつもながら大変素晴らしいと思っています。



深夜まで活発な議論が続く交流会の様子

本領域の全体班会議も今回で最後で、あとは班員全員が集まるのは国際シンポジウムでしょうか。私個人は、本領域で様々な分野の方と交流ができ、多くの方との共同研究が生まれ、ある意味人生を変えた期間でした。全体班会議に参加して、日常から離れた環境で普段会わない方々と顔を合わせてサイエンスの議論ができたことは、その後の研究を進める上で大きなエネルギー源になりました。もうこんな機会が無いかと思うと寂しい限りですが、今後も本領域、班会議での出会いを大切にし、研究に励んでいきたいと思います。



集合写真



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

全体班会議印象記 2

三宅弘之
(大阪市立大学理学研究科・
A02 公募研究代表者)



新学術領域「動的秩序と機能」の最後の全体班会議が6月2日（金）～5日（月）に沖縄県沖縄科学技術大学学院大学（OIST）カンファレンスセンターにて、佐藤宗太先生（東京大学）と東雅大先生（琉球大学）のお世話で開催されました。小雨のなか那覇空港に到着し期間中の天候に不安を感じましたが、2日目からは良い天気に恵まれ、素晴らしい環境で研究ディスカッションと沖縄の雰囲気を満喫することができました。小生にとっては初沖縄で、到着早々いきなり空港での待ち時間に味わった沖縄料理にいささか興奮気味でした。ここではA02班の発表の様子を中心に報告いたします。様々な勘違いや推測が入り混じっているかもしれませんのが何卒ご容赦ください。

初日（6/2）は領域代表の加藤晃一先生（自然科学研究機構）の挨拶の後、OISTの紹介と4つの班に分かれての施設見学会がありました。OISTの研究環境はすばらしく、機器設備はもちろん最先端であり、また、建物全体のデザインがオープンで、自由な雰囲気で活発な研究が行われている様子を感じることができました。見学会のあとにホテルにチェックインし、夕食会、および懇親会で（ほとんどのメンバーにとって4年目となるので）気心の知れたメンバー間の親睦をさらに深めることができました。



今回の班会議をお世話してくださった佐藤宗太先生によるご発表の様子

2日目（6/3）に第2班のメンバー5人による発表がありました。今回は今までの班会議とは異なり、あいうえお順の後ろからの発表でした。いつもは会議の最後の方で話をすることが多い方が班の最初に話をした

ため、意外と新鮮な気持ちで発表でき、好評でした。まず、佐藤宗太先生は加藤グループとの共同研究成果である「サイボーグ分子」の紹介の後、144成分からなる巨大な4価ゴールドバーグ多面体に属するカプセル分子の合成に成功したとの報告がありました。三宅からは動的な配位結合を活用したらせん型金属錯体の動的反転と伸縮運動について進捗状況と今後の展開について報告をしました。松浦友亮先生（大阪大学）はA02班の班員である神谷由紀子先生（名古屋大学）との共同研究として、アゾベンゼン含有オリゴヌクレオチドを用いた、リポソームによるタンパク質発現反応の光刺激による制御について報告されました。鈴木大介先生（信州大学）はBZ反応を示す高分子微粒子の短周期なミクロ空間パターンの変化について報告されました。飯野亮太先生（自然科学研究機構）は結晶性多糖を加水分解するセルラーゼやキチナーゼを用いて、運動の方向性を決める因子は何かについてタンパク質工学の観点から現状を報告されました。



ホテルの窓からの素晴らしいビーチの眺め

3日目（6/4）は班友である澤田知久先生（東京大学）からペプチド超分子錯体ハイブリッドの構造について報告がありました。2nmもの大きな穴の空いたネットワーク構造の形成と、共存するアニオンや有機ゲスト分子への置換基の導入によりネットワーク構造が変わる興味深い系でした。次いで長田裕也先生（京都大学）からA03班の杉山正明先生との共同研究の成果である小角中性子散乱によるらせん型超分子の構造決定とキラルアルコールの不斉増幅について報告がありました。重田育照先生（筑波大学）からは、いくつかのタンパク質の動的構造変換の様子をMDシミュレーションにより再現できることを示されました。その後、千葉順哉先生（富山大学・井上将彦先生代理）から人工DNAの合成と天然DNAとの比較について有機合成化学的アプローチを報告されました。二木史朗先生（京都大学）はポリアルギニンの生体膜透過に



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

による曲率誘導について話をされました。杉安和憲先生（物質・材料研究機構）からポルフィリン誘導体の集合体形成の動的挙動について、エネルギー・ランドスケープに基づく高次構造と機能の制御において、速度論的な粒子の形成と熱力学的なファイバーの形成について詳しく報告されました。また、今後の方向性についてもディスカッションされました。神谷由紀子先生は人工核酸により発動する細胞様機能の構築として、蛍光色素を導入した人工核酸の細胞内での機能発現について報告されました。さらに、片山勉先生（九州大学）は大腸菌染色体DNAの複製系に関して、ATP-DnaAやDARS-DDAH運動システムについて報告されました。最後に班長である平岡秀一先生（東京大学）から新しくデザインした水溶性ナノキューブの作成と、熱安定性と速度論的安定性、およびゲスト包摶能力と体積変化、さらには、自己集合型Pd錯体の形成経路について報告がありました。



班友の長田裕也先生によるご発表の様子

4日目（6／5）は芳坂貴弘先生（北陸先端科学技術大学院大学）から非天然アミノ酸の特異的導入技術を活用した光クロスリンクについて最近の成果を紹介されました。大谷亮先生（熊本大学）は錯体化学を利用した脂質膜の合成と複合体の粘性について発表されました。錯体脂質のモルフォロジーの変化や相転移温度の変化など興味深い系でした。上野隆史先生（東京工業大学）はフェリチンタンパク質内の金イオンの集積・金クラスターの形成などタンパク質の結晶化を活用した材料の開発に向けたお話を加え、フェリチンの結晶化過程をHS-AFMで観測できる（A01班内橋先生との共同研究）ことを紹介されました。最後に、新井亮一先生（信州大学）はタンパク質の複合体を人工的にデザインして形成することに関する最近の成果を報告されました。



A02班長の平岡先生と筆者。9月の
錯体化学会討論会でシンポジウムを
開催いたしますので、是非お越し下さい。

毎日のディスカッションは大いに白熱したため時間が予定よりも押してしまい、夕食に間に合わせるため大急ぎでホテルへ移動することもありました。最終日も飛行機に間に合うかどうかギリギリの状態の方が多く最後まで活発にディスカッションが行われていました。どの演者も領域内共同研究を活発に行なっており、研究の濃密な進展を伺うことができました。



2日目のミキサーの様子

次回はいよいよ最後の会議として、浜松にて国際会議を行うと連絡がありました（2018年1月20日（土）-21日（日））。この領域で活動する残り期間は少なくなりましたが、素晴らしい研究成果が生み出されると大いに期待される4日間でした。



帰阪の飛行機に搭乗するまでの待ち時間を
利用して大急ぎで立ち寄った首里城（守礼門）。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

全体班会議印象記 3

山本量一
(京都大学工学研究科・A03 公募研究代表者)



昨年から公募研究で A03 班に参加させていただいております。早いもので、前回の長浜市での全体班会議から 1 年が過ぎてしましました。研究期間も残り半分弱となり若干焦りを感じているところですが、先ごろ 6 月 2 日～5 日に沖縄科学技術大学学院大学 (OIST) にて行われた全体班会議の模様について、個人的に感じたことなどを、ご報告させていただきます。

今回は、まず場所について述べない訳にはいきません。会場となった OIST は沖縄本島の中部に位置し、那覇から車で 1 時間弱北上したところにあります。キャンパスは海岸線からそう遠くない小高い丘の上にあり、そこから見下ろす沖縄の海は一面エメラルドグリーンで、ここより景色の美しい大学キャンパスは、世界中探してもどこにもないに違いないと確信させるほどでした。



OIST の建物内より珊瑚礁の海を望む

広い敷地内には、非常に設備の整った研究室が居並ぶ研究棟に加え、教員や大学院生のための居住施設のほか、保育園や簡単な商業施設も併設されています。その一角にカンファレンスセンターがあり、今回全体班会議で使用したメインホールも最大 500 人収容の立派なもので。OIST を訪れるのは今回が初めてでしたが、感想を一言で表すなら、「物質的にも精神的に

も既存の大学の概念を超えた贅沢な施設で羨ましい限り」に尽きます。



カンファレンスセンターでの講演の様子

一方で、贅沢さの代償なのかシニアに偏った人口構成を反映してかはわかりませんが、普通の大学にありがちな、雑然としつつも活気に溢れた独特の賑わいに欠ける点については、老婆心ながら少し気になりました。せっかくこれだけの素晴らしい施設ですから、OIST 単体での活動に加えて、日本中・世界中の大学や研究機関との人的交流をさらに促進することが、ひいては OIST の存在価値を高めることにつながるのは間違いなさそうです。そういう意味で、今回本新学術領域の全体班会議の会場として OIST を利用したことは、まったく理にかなっていると思った次第です。

さて、そろそろ肝心の全体班会議についてご報告しなければなりません。1 日目には OIST のラボ見学会があったのですが、あいにく私は別の用務で到着が遅く、参加することが出来ませんでした。2 日目は、朝 9 時から夕方 19 時まで、15 分刻みで 25 件の講演がありました。午前中は、領域代表の加藤先生のご挨拶に続いて A03 班から多岐にわたる内容の発表がありましたが、議論が白熱し、予定をかなりオーバーしての集合写真・昼食となりました。午後は、A02 班、A01 班、A03 班の順で、密度の濃い発表がありました。超分子や人口生体分子が思いのままに作られる（様に見える）のは、いつ聞いても驚きの連続です。これらの難問に計算科学がどこまで貢献できるかも興味深い問題です。また、個人的には飯野先生が触れられた「機能を実現するためにシーケンスをデザインする」という問題が、我々シミュレーション稼業で言うところの



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

「逆問題」と同じで、実現に向けてどうしたものかと純粹に興味を持ちました。ぜひ何らかの進展に期待したいところです。A03班から発表のあった膜や自走細胞の問題は、自分自身の興味の対象と非常に近く、個人的に大変興味を持ちました。

3日目は午前中に12件の発表があり、午後は班員の自由討議の時間に充てられました。4日目は午前中に13件の発表があり、お昼で散会となりました。いずれの発表も興味深く、手元のメモに基づいて個別にコメントしたいところですが、紙面の都合でそうもいかず、以下のざっくりとした感想に終止しますことをご容赦ください。全体的に、いずれの研究も確実に進展があったことと、質疑応答が白熱したものであったことが、強く印象に残る全体班会議でした。本領域は、超分子と生体分子について、合成から物性測定、計算科学による解析から応用に至る柱となる研究がしっかりとしていることが最大の強みであり、加えてその周辺にそれぞれ興味深い研究が絶妙のバランスで分散していることが成果に幅をもたらしていると（勝手ながら）再認識すると同時に、それぞれの研究の進捗状況に大きな刺激を受けました。私が担当する公募研究では、細胞や微生物が集団で運動する際に示す、非生物には見られない特徴的な運動の起源について、単純なモデルを用いて理解を深めることを目標としております。全体の位置付けとしては、貴重な周辺部分の一角を担わせて頂いていると自覚しておりますので、あと1年弱ではありますが、よりよい研究成果を得られるように努力いたします。



2日目の夜のミキサーの様子。日付が変わっても話が尽きません…

最後にOIST周辺の様子についてご紹介します。今回参加者の宿となったのは、OISTからバスで10分程度の海沿いにあるホテルモントレ沖縄でした。さすが大規模なリゾートホテルだけあって、100名を有に超える大集団にも関わらず、朝食も夕食も十分に余裕を持って取ることができ、おかげで参加者同士のコミュニケーションの促進にもつながったように思います。夕食後も議論は尽きることなく、1日目と3日目はホテル内の会場で、2日目は近所の居酒屋へと場所を移し、講演会場とは異なる和気あいあいとした雰囲気の中で、思う存分討論が続けられました。このような催しが、我々にとっては新しい人間関係を構築するための、学生たちにとってこれまで聞きたくても聞けなかつた質問を先生方にぶつけるための絶好の機会を提供してくれることは言うまでもありません

ホテルの目の前こそ白い砂浜のプライベートビーチでしたが、このあたりの海岸は岩場が多く、断崖絶壁で有名な「万座毛」、ダイビングで有名な「真栄田岬」、灯台のある「残波岬」など、有名な景勝地が近くにあります。当然外国からの観光客も多く、ホテルの中も国際色豊かな楽しげな雰囲気でした。ぜひ、今度は私用で家族と再訪したいところです。



真栄田岬よりホテル方面を望む

文末になりましたが、今回の全体班会議の準備に時間と労力を費やし、大成功へと導いてくださった皆様、中でも特に、世話人である佐藤先生と東先生、琉球大学のスタッフ・学生の皆様に感謝申し上げて、結びの言葉といたします。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

活動報告 第69回日本細胞生物学会大会シンポジウム

稻垣直之

(奈良先端科学技術大学院大学・バイオサイエンス研究科・A03 計画研究代表者)



加藤晃一

(自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター・A03 計画研究代表者)



本領域は、2017年6月13-15日に開催された第69回日本細胞生物学会大会のシンポジウムを共催いたしました。今年の日本細胞生物学会は、A03班員の水野健作先生を大会長として仙台で開催され、大会初日に行われたシンポジウム「分子の集合・離脱がつかさどる動的な細胞機能」をA03班員の稻垣と領域代表の加藤がオーガナイズしました。

本シンポジウムでは、細胞の機能を分子の動的な構造変化や集合・離脱をといった、よりミクロの視点から焦点を当てた最新の研究成果を紹介し、本領域の活動や若手研究者の研究の紹介も交えて細胞機能の発現のしくみを議論しました。まず領域代表の加藤から本領域の活動内容とプロテアソームの分子マシナリー研究の紹介がなされた後、秋山修志先生(A01班員)、内橋貴之先生(A01班員)、佐甲靖志先生(A03班員)、柏原宏香さん(大阪大学大学院・医学系研究科)、稻垣の順で以下の講演がなされました。

加藤晃一「生命分子の集合離散が織りなす細胞機能研究の最前線」

秋山修志「藍藻生物時計システムにおける概日周期の根源と貫階層性」

内橋貴之「高速AFMで明らかにするKaiタンパク質間の動的相互作用」

佐甲靖志「細胞膜受容体の運動・会合体形成による情報伝達」

柏原宏香「中心体機能制御インターフェースとしてのアヘンデージ構造の分子機構」

稻垣直之「新たな細胞内分子輸送機構Actin Waveと細胞形態形成」

今回のシンポジウムは、演者の半数が日本細胞生物学会の非会員でもあり、班員のNMRや高速AFM、1分子計測といった最先端の手法を交えた分子動態の解析の講演は学会員にとって大変新鮮であり、フロアからの活発な質問と熱気に溢れる議論がありました。また、公募若手研究者の柏原さんが発表した細胞周期に伴う中心体の動態とメカニズムに関する講演もシンポジウムの趣旨に沿った大変興味深いものでした。シンポジウムの最後には、「Meet the Speakers」の企画があり、各講演者と聴衆との間の活発な議論と情報交換が続きました。

最後になりますが、本領域と日本細胞生物学会会員との有意義な交流の場としてのシンポジウムの機会をいただいた水野先生と、ご講演をいただいた演者の皆様に感謝を申し上げます。



大会長および講演者のシンポジウム後の集合写真。左から、柏原、稻垣、佐甲、水野、加藤、内橋、秋山



シンポジウム後の「Meet the Speakers」で演者と聴衆の間に続く議論



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

田中良和班員の研究成果が新聞に掲載される

A03 公募研究代表者の田中良和班員の研究成果が 2017 年 5 月 18 日付の朝日新聞(宮城版)に掲載されました。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

最近の動き

雑誌論文

1. Y. Yoshida, *H. Sato, J.W.R. Morgan, D.J. Wales, “Potential Energy Landscapes of Tetragonal Pyramid Molecules”, *Chem. Phys. Lett.*, **664**, 5- 9, (2016), <http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.cplett.2016.09.058>
(Editor's choice, Front Cover に採用)
2. S. Nozue, A. Mukuno, Y. Tsuda, T. Shiina, M. Terazima, *S. Kumazaki, “Characterization of Thylakoid Membrane in Filamentous Cyanobacteria and Green Alga with Dual-detector Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy with a Systematic Change of Incident Laser Power”, *Biochim. Biophys. Acta.*, **1857**, 46-59, (2016), [10.1016/j.bbabi.2015.10.003](https://doi.org/10.1016/j.bbabi.2015.10.003)
3. K. Kuroi, F. Sato, Y. Nakasone, K. Zikihara, S. Tokutomi, *M. Terazima, “Time-Resolved Fluctuation during the Photochemical Reaction of a Photoreceptor Protein: Phototropin1LOV2-Linker”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 6228-6238, (2016), [10.1039/c5cp07472j](https://doi.org/10.1039/c5cp07472j)
4. T. Yoshitake, T. Toyooka, Y. Nakasone, K. Zikihara, S. Tokutomi, *M. Terazima, “Macromolecular Crowding Effect for Photoreactions of LOV2 Domains of Arabidopsis Thaliana Phototropin 1”, *J. Mol. Liq.*, **217**, 43-50, (2016), <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2015.08.030>
5. S. Choi, Y. Nakasone, K. J Hellingwerf, *M. Terazima, “Photochemical Reactions of the LOV and the LOV-linker Domains of the Blue Light Sensor Protein YtvA”, *Biochemistry*, **55**, 3107-3115, (2016), [10.1021/acs.biochem.6b00263](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.6b00263)
6. T. Nakajima, K. Kuroi, Y. Nakasone, K. Okajima, M. Ikeuchi, S. Tokutomi, *M. Terazima, “Anomalous Pressure Effects on the Photoreaction of a Light-sensor Protein from Synechocystis, PixD (Slr1694), and the Compressibility Change of its Intermediates”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 25915-25925, (2016), [10.1039/C6CP05091C](https://doi.org/10.1039/C6CP05091C)
7. Y. Nakasone, H. Ooi, Y. Kamiya, H. Asanuma, *M. Terazima, “Dynamics of Inter-DNA Chain Interaction of Photoresponsive DNA”, *J. Am. Chem. Soc. (Communication)*, **138**, 9001-9004, (2016), [10.1021/jacs.6b02525](https://doi.org/10.1021/jacs.6b02525)
8. Y. Akiyama, Y. Nakasone, Y. Nakatani, O. Hisatomi, *M. Terazima, “Time-resolved Detection of Light-induced Dimerization of Monomeric Aureochrome-1 and Change in Affinity for DNA”, *J. Phys. Chem. B*, **120**, 7360-7370, (2016), [10.1021/acs.jpcb.6b05760](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b05760)
9. L. Zhang, H. Kondo, H. Kamikubo, M. Kataoka, *W. Sakamoto, “VIPP1 has a Disordered C-terminal Tail Necessary for Protecting Photosynthetic Membranes against Stress in Arabidopsis”, *Plant Physiology*, **171**, 1983-1995, (2016), [10.1104/pp.16.00532](https://doi.org/10.1104/pp.16.00532)
10. J. K. Endow, A. G. Rocha , A. J. Baldwin , R. L. Roston , T. Yamaguchi, H. Kamikubo, *K. Inoue, “Polyglycine Acts as a Rejection Signal for Protein Transport at the Chloroplast Envelope”, *PLOS ONE*, **11**(12), e0167802, (2016),



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- [10.1371/journal.pone.0167802](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0167802)
11. Y. Yoshimura, N. A. Oktaviani, K. Yonezawa, H. Kamikubo, F. A. A. *Mulder, “Unambiguous Determination of the Ionization State of a Photoactive Protein Active Site Arginine in Solution by NMR Spectroscopy”, *Angewandte Chemie*, **56**, 239-242, (2016), [10.1002/anie.201609605](https://doi.org/10.1002/anie.201609605)
12. H. Kuramochi , S. Takeuchi ,K. Yonezawa , H. Kamikubo, M. Kataoka, *T.Tahara, “Probing the Early stages of Photoreception in Photoactive Yellow Protein with Ultrafast Time-domain Raman Spectroscopy”, *Nature Chemistry*, **9**, 660-666, (2017), [10.1038/nchem.2717](https://doi.org/10.1038/nchem.2717)
13. Y. Furuike, J. Abe, A. Mukaiyama, *S. Akiyama, “Accelerating in Vitro Studies on Circadian Clock Systems Using an Automated Sampling Device”, *Biophysics and Physicobiology*, **13**, 235-241, (2016), [10.2142/biophysico.13.0_235](https://doi.org/10.2142/biophysico.13.0_235)
14. *A. Suematsu, A. Yoshimori, R. Akiyama, “Effects of Interactions between Depletants in Phase Diagrams of Binary Hard-sphere Systems”, *EPL*, **116**, 38004-1-7, (2016), [10.1209/0295-5075/116/38004](https://doi.org/10.1209/0295-5075/116/38004)
15. T. Ikeya, T. Hanashima, S. Hosoya, M. Shimazaki, S. Ikeda, M. Mishima, P. Güntert, *Y. Ito, “In-cell Structure Determination of Proteins at Near-physiological Concentration”, *Sci. Rep.*, **6**, 38312, (2016), [10.1038/srep38312](https://doi.org/10.1038/srep38312)
16. Y. Hikone, G. Hirai, M. Mishima, K. Inomata, T. Ikeya, S. Arai, M. Shirakawa, M. Sodeoka, *Y. Ito, “A New Carbamidemethyl-linked Lanthanide Chelating Tag for PCS NMR Spectroscopy of Proteins in Living HeLa cells” *J. Biomol. NMR*, **66**, 99-110, (2016), [10.1007/s10858-016-0059-4](https://doi.org/10.1007/s10858-016-0059-4)
17. Y. Nishida, T. Ikeya, T. Mikawa, J. Inoue, Y. Ito, Y. Shintani, R. Masui, S. Kuramitsu, *S. Takashima, “A Specific Single-stranded DNA Induces a Distinct Conformational Change in the Nucleoid-associated Protein HU”, *BB Reports*, **8**, 318–324, (2016), [10.1016/j.bbrep.2016.09.014](https://doi.org/10.1016/j.bbrep.2016.09.014)
18. *T. Takaya, K. Iwata, “Development of a Femtosecond Time-resolved Near-IR Multiplex Stimulated Raman Spectrometer in Resonance with Transitions in the 900–1550 nm Region”, *Analyst* **141**, 4283-4292, (2016), [10.1039/c6an01051b](https://doi.org/10.1039/c6an01051b)
(Cover Article, “HOT research article”に採用)
19. F. Lu, *T. Takaya, K. Iwata, I. Kawamura, A. Saeki, M. Ishii, K. Nagura, *T. Nakanishi, “A Guide to Design Functional Molecular Liquids with Tailorable Properties using Pyrene-Fluorescence as a Probe”, *Sci. Rep.*, in press, (2017), [10.1038/s41598-017-03584-1](https://doi.org/10.1038/s41598-017-03584-1)
20. A. Sumino, T. Uchihashi, *S. Oiki , “Oriented Reconstitution of the Full-Length KcsA Potassium Channel in a Lipid Bilayer for AFM Imaging”, *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 785-793, (2017), [10.1021/acs.jpclett.6b03058](https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.6b03058)
21. K. Inoue, S. Ito, Y. Kato, Y. Nomura, M. Shibata, T. Uchihashi, S. P. Tsunoda, *H. Kandori, “A Natural Light-driven Inward Proton Pump”, *Nat. Commun.* **8**, 13415, (2016), [10.1038/ncomms13415](https://doi.org/10.1038/ncomms13415)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

22. K. Iijima, D. Aoki, H. Sogawa, S. Asai, *T. Takata, “Synthesis and Characterization of Supramolecular Cross-linkers Containing Cyclodextrin Dimer and Trimer,” *Polym. Chem.*, **7**, 3492–3495, (2016), [10.1039/C6PY00367B](https://doi.org/10.1039/C6PY00367B)
23. H. Sato, D. Aoki, *T. Takata, “Synthesis and Star/Linear Topology Transformation of a Mechanically Linked ABC Terpolymer” *ACS Macro Lett.*, **5**, 699–703, (2016), [10.1021/acsmacrolett.6b00320](https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.6b00320)
24. J. Sawada, D. Aoki, M. Kuzume, K. Nakazono, H. Otsuka, *T. Takata, “A vinylic rotaxane cross-linker for toughened network polymers from the radical polymerization of vinyl monomers”, *Polym. Chem.*, **8**, 1878–1881, (2017), [10.1039/C7PY00193B](https://doi.org/10.1039/C7PY00193B)
25. H. Jang, K. Iijima, Y. Koyama, S. Uchida, S. Asai, *T. Takata, “Synthesis and Properties of Rotaxane-cross-linked polymers using a double-stranded γ -CD-based inclusion complex as a supramolecular cross-linker “ *Polymer* (2017) in press, [10.1016/j.polymer.2017.01.062](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.01.062)
26. K. Iijima, D. Aoki, H. Otsuka, *T. Takata, “Synthesis of Rotaxane Cross-linked Polymers with Supramolecular Cross-linkers Based on γ -CD and PTHF Macromonomers: The effect of the Macromonomer Structure on the Polymer Properties”, *Polymer*, (2017), in press, [10.1016/j.polymer.2017.01.024](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.01.024)
27. *T. Takayanagi, K. Suzuki, T. Yoshida, Y. Kita, M. Tachikawa, “Quantum Dynamics Study on the Binding of a Positron to Molecules”, *AIP Conf. Proc.*, in press, (2017), [10.1088/1742-6596/791/1/012015](https://doi.org/10.1088/1742-6596/791/1/012015)
28. K. Yamamoto, Y. Kanematsu, U. Nagashima, A. Ueda, H. Mori, *M. Tachikawa, “Multicomponent DFT Study of Geometrical H/D Isotope Effect on Hydrogen-bonded Organic Conductor, κ -H₃(Cat EDT-ST)₂”, *Chem. Phys. Lett.*, in press, (2017), [10.1016/j.cplett.2017.02.073](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.02.073)
29. *C. Ngaojampa, T. Kawatsu, Y. Oba, N. Kungwan, *M. Tachikawa, “Asymmetric Hydrogen Bonding in Formic Acid-nitric Acid Dimer Observed by Quantum Molecular Dynamics Simulations”, *Theor. Chem. Acc.*, in press, (2017), [10.1007/s00214-017-2057-3](https://doi.org/10.1007/s00214-017-2057-3)
30. *T. Udagawa, K. Sugiura, K. Suzuki, *M. Tachikawa, “Unusual H/D isotope effect in isomerization and keto-enol tautomerism reactions of pyruvic acid: Nuclear quantum effect restricts some rotational isomerization reactions”, *RSC Advances*, **7**, 9328–9337, (2017), [10.1039/C6RA28271G](https://doi.org/10.1039/C6RA28271G)
31. T. Mashiko, S. Hiraoka, U. Nagashima, *M. Tachikawa, “Theoretical Study on Substituent and Solvent Effects for Nanocube Formed with Gear-shaped Amphiphile Molecules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 1627–1631, (2017), [10.1039/C6CP07754D](https://doi.org/10.1039/C6CP07754D)
32. Y. Kita, *M. Tachikawa, “Effects of Vibrational Anharmonicity and Inter-mode Couplings on the Binding Energy of a Positron to Molecules”, *AIP Conf. Proc.*, in press, (2017), [10.1088/1742-6596/791/1/012015](https://doi.org/10.1088/1742-6596/791/1/012015)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

33. *T. Udagawa, *M. Tachikawa, “Nuclear Quantum Effect and H/D Isotope Effect on F + (H₂O)_n → FH + (H₂O)_{n-1}OH (n = 1-3) Reactions”, *J. Chem. Phys.*, **145**, 164310 (10 pages), (2016), [10.1063/1.4966162](https://doi.org/10.1063/1.4966162)
34. K. Yamamoto, Y. Kanematsu, U. Nagashima, A. Ueda, H. Mori, *M. Tachikawa, “Theoretical Study of H/D Isotope Effect on Phase Transition of Hydrogen-bonded Organic Conductor κ-H₃(Cat-EDT-TTF)₂”, *Phys. Chem. Chem. Phys. (Communication)*, **18**, 29673-29680, (2016), [10.1039/C6CP05414E](https://doi.org/10.1039/C6CP05414E)
35. Y. Hamada, Y. Kanematsu, *M. Tachikawa, “QM/MM Study on Sialyltransferase Reaction Mechanism”, *Biochemistry*, **55**, 5764-5771, (2016), [10.1021/acs.biochem.6b00267](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.6b00267)
36. M. Narukawa-Nara, A. Nakamura, K. Kikuzato, Y. Kakei, A. Sato, Y. Mitani, Y. Yamasaki-Kokudo, T. Ishii, KI. Hayashi, T. Asami, T. Ogura, S. Yoshida, S. Fujioka, T. Kamakura, T. Kawatsu, M. Tachikawa, K. Soeno, *Y. Shimada, “Aminoxy-naphthylpropionic Acid and its Derivatives are Inhibitors of Auxin Biosynthesis Targeting Trp Aminotransferase: Structure-Activity Relationships”, *The Plant Journal*, **87**, 245-257, (2016), [10.1111/tpj.13197](https://doi.org/10.1111/tpj.13197)
37. Y. Oba, T. Kawatsu, *M. Tachikawa, “A Path Integral Molecular Dynamics Study of the Hyperfine Coupling Constants of the Muoniated and Hydrogenated Acetone Radicals”, *J. Chem. Phys.*, **145**, 064301 (15 pages), (2016), [10.1063/1.4960077](https://doi.org/10.1063/1.4960077)
38. Y. Ogata, T. Kawatsu, *M. Tachikawa, “Can Low-barrier Hydrogen Bond Exist in Systems with Second Row Elements? An ab Initio Path Integral Molecular Dynamics Study for Deprotonated Hydrogen Sulfide Dimer”, *Theor. Chem. Acc.*, **135**, 200 (11 pages), (2016), [10.1007/s00214-016-1958-x](https://doi.org/10.1007/s00214-016-1958-x)
39. M. Nummela, *H. Raebiger, D. Yoshida, M. Tachikawa, “Positron Binding Properties of Glycine and Its Aqueous Complexes”, *J. Phys. Chem. A*, **120**, 4037-4042, (2016), [10.1021/acs.jpca.6b01780](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.6b01780)
40. *Y. Kanematsu, Y. Takano, M. Tachikawa, “Inverse Ubbelohde Effect in the Short Hydrogen Bond of Photosystem II: Relation between H/D Isotope Effect and Symmetry in Potential Energy Profile”, *J. Comput. Chem.*, **37**, 2140-2145, (2016), [10.1002/jcc.24438](https://doi.org/10.1002/jcc.24438) (Cover Image に採用)
41. Y. Takeda, *Y. Kita, *M. Tachikawa, “Theoretical Study of a Positron-attachment to Vibrational Excited States for Non-polar Carbon Disulfide Molecule”, *Eur. Phys. J. D*, **70**, 132 (5 pages), (2016), [10.1140/epjd/e2016-70140-7](https://doi.org/10.1140/epjd/e2016-70140-7)
42. Y. Oba, T. Kawatsu, *M. Tachikawa, “Thermal Dependence on Structures of Muoniated and Hydrogenated Acetone Radicals”, *AIP Conf. Proc.*, **1790**, 020022 (4pages), (2016), [10.1063/1.4968648](https://doi.org/10.1063/1.4968648)
43. M. Hashimoto, T. Ishimoto, *M. Tachikawa, *T. Udagawa, “Analysis of Exponent Values of Gaussian-type Functions on Quantum Protons and Deuterons in Charged or Polarized Systems”, *Int. J. Quant. Chem.*, **116**, 961-967, (2016), [10.1002/qua.25117](https://doi.org/10.1002/qua.25117)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

(Cover Image に採用)

44. Y. Kanematsu, H. Kamikubo, M. Kataoka, *M. Tachikawa, “Vibrational Analysis on the Revised Potential Energy Curve of the Low-barrier Hydrogen Bond in Photoactive Yellow Protein”, *Comput. Struct. Biotechnol. J.*, **14**, 16-19, (2016), [10.1016/j.csbj.2015.10.003](https://doi.org/10.1016/j.csbj.2015.10.003)
45. T. Asakura, K. Horiguchi, A. Aoki, Y. Tasei, A. Naito, “Parallel β -sheet Structure of Alanine Tetrapeptide in the Solid State as Studied by Solid-state NMR Spectroscopy”, *J. Phys. Chem. B.*, **120**, 8912-8941, (2016), [10.1021/acs.jpcb.6b06292](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b06292)
46. K. Kamgar-Parsi, J. Tolchard, B. Habenstein, A. Loquest, A. Naito, *A. Ramamoorthy, “Structural Biology of Calcitonin: from Aqueous Therapeutic Properties to Amyloid Aggregation”, *Isr. J. Chem.*, (2016), in press, [10.1002/ijch.201600096](https://doi.org/10.1002/ijch.201600096)
47. K. Norisada, N. Javkhlanugs, D. Mishima, I. Kawamura, H. saito, K. Ueda, *A. Naito, “Dynamic Structure and Orientation of Melittin Bound to Acidic Lipid Bilayers, as Revealed by Solid-state NMR and Molecular Dynamic Simulation”, *J. Phys. Chem. B.* **121**, 1802-1811, (2017), [10.1021/acs.jpcb.6b11207](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b11207)
48. *T. Asakura, K. Miyazawa, Y. Tasei, S. Kametani, Y. Nakazawa, A. Aoki, A. Naito, “Packing Arrangement of ^{13}C selectively Labeled Sequence Model Peptides of Samia Cynthia Ricini Silk Fibroin Fiber Studied by Solid-state NMR”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, (2017), in press, [10.1039/C7CP01199G](https://doi.org/10.1039/C7CP01199G)
49. S. Tanimoto, *M. Higashi, *N. Yoshida, H. Nakano, “The Ion-dependence of Carbohydrate Binding of CBM36: MD and 3D-RISM Study”, *J. Phys., Condens. Matter*, **28**, 344005, (2016), [10.1088/0953-8984/28/34/344005](https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/34/344005)
50. K. Watanabe, *N. Nakatani, A. Nakayama, M. Higashi, *J. Hasegawa, “Spin-blocking Effect in CO and H₂ Binding Reactions to Molybdenocene and Tungstenocene: A theoretical Study on the Reaction Mechanism via Minimum Energy Intersystem-crossing Point”, *Inorg. Chem.* **55**, 8082-8090, (2016), [10.1021/acs.inorgchem.6b01187](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b01187)
51. *M. Higashi, *S. Saito, “Quantitative Evaluation of Site Energies and their Fluctuations of Pigments in the Fenna-Matthews-Olson Complex with an Efficient Method for Generating a Potential Energy Surface”, *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 4128-4137, (2016), [10.1021/acs.jctc.6b00516](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.6b00516)
52. Y. Toma, M. Kunigami, K. Watanabe, *M. Higashi, *S. Arimitsu, “One-pot Synthesis and Theoretical Calculation for Trifluoromethylated Pyrrolizidines by 1,3-dipolar Cycloaddition with Azomethine Ylides and β -trifluoromethyl Acrylamides”, *J. Fluor. Chem.* **22**, 189, (2016), [10.1016/j.jfluchem.2016.07.013](https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2016.07.013)
53. I. Hermawan, A. Furuta, M. Higashi, Y. Fujita, N. Akimitsu, A. Yamashita, K. Moriishi, S. Tsuneda, H. Tani, M. Nakakoshi, M. Tsubuki, Y. Sekiguchi, *N. Noda, *J. Tanaka, “Four Aromatic Sulfates with an Inhibitory Effect against HCV NS3 Helicase from the Crinoid *Alloeocomatella polycladlia*”, *Mar. Drugs* **15**, 117, (2017), [10.3390/md15040117](https://doi.org/10.3390/md15040117)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

54. A. Agena, S. Iuchi, M. Higashi, “Theoretical Study on Photoexcitation Dynamics of a Bis-diimine Cu(I) Complex in Solutions,” *Chem. Phys. Lett.*, **679**, 60-65, [10.1016/j.cplett.2017.04.082](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.04.082)
55. J. Fujita, *R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, *H. Matsumura, “Identification of the Key Interactions in Structural Transition Pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*”, *J. Struct. Biol.*, in press, [10.1016/j.jsb.2017.04.008](https://doi.org/10.1016/j.jsb.2017.04.008)
56. T. Kono, S. Mehrotra, C. Endo, N. Kizu, M. Matsuda, H. Kimura, E. Mizohata, T. Inoue, T. Hasunuma, A. Yokota, *H. Matsumura, *H. Ashida, “A RuBisCO-mediated Carbon Metabolic Pathway in Methanogenic Archaea”, *Nature Commun.*, **8**(14007), 1-12 (2017), [10.1038/ncomms14007](https://doi.org/10.1038/ncomms14007)
57. *T. Sato, T. Kawasaki, S. Mine, H. Matsumura, “Functional role of the C-terminal Amphipathic Helix 8 of Olfactory Receptors and Other G Protein-coupled Receptors”, *Int. J. Mol. Sci.*, **17**(11), 1930, (2016), [10.3390/ijms17111930](https://doi.org/10.3390/ijms17111930)
58. Y. Tominaga, M. Maruyama, M. Yoshimura, H. Koizumi, M. Tachibana, S. Sugiyama, H. Adachi, K. Tsukamoto, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, T. Inoue, *H. Y. Yoshikawa, Y. Mori, “Promotion of Protein Crystal Growth by Actively Switching Crystal Growth Mode via Femtosecond Laser Ablation”, *Nature Photonics*, **10**, 723-726, (2016), [10.1038/nphoton.2016.202](https://doi.org/10.1038/nphoton.2016.202)
59. *M. Maruyama, Y. Hayashi, H. Y. Yoshikawa, S. Okada, H. Koizumi, M. Tachibana, S. Sugiyama, H. Adachi, H. Matsumura, T. Inoue, K. Takano, S. Murakami, M. Yoshimura, Y. Mori, “A Crystallization Technique for Obtaining Large Protein Crystals with Increased Mechanical Stability Using Agarose Gel Combined with a Stirring Technique”, *J. Crystal Growth*, **452**, 172-178, (2016), [10.1016/j.jcrysgro.2015.11.008](https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2015.11.008)
60. S. Sugiyama, S. Ishikawa, H. Tomitori, M. Niiyama, M. Hirose, Y. Miyazaki, K. Higashi, M. Murata, H. Adachi, K. Takano, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori, K. Kashiwagi, K. Igarashi, *H. Matsumura, “Molecular Mechanism Underlying Promiscuous Polyamine Recognition by Spermidine Acetyltransferase”, *Int. J. Biochem. Cell Biol.*, **76**, 87-97, (2016), [10.1016/j.biocel.2016.05.003](https://doi.org/10.1016/j.biocel.2016.05.003)
61. M. Kinoshita, K.G.N. Suzuki, *N. Matsumori, M. Takada, H. Ano, K. Morigaki, M. Abe, A. Makino, T. Kobayashi, K.M. Hirosawa, T. K. Fujiwara, *A. Kusumi, M. Murata, “Raft-based Sphingomyelin Interactions Revealed by New Fluorescent Sphingomyelin Analogs” *J Cell Biol.*, **216**, 1183, (2017), [10.1083/jcb.201607086](https://doi.org/10.1083/jcb.201607086)
62. T. Nakane, S. Hanashima, M. Suzuki, H. Saiki, T. Hayashi, K. Kakinouchi, S. Sugiyama, S. Kawatake, S. Matsuoka, N. Matsumori, E. Nango, J. Kobayashi, T. Shimamura, K. Kimura, C. Mori, N. Kunishima, M. Sugahara, Y. Takakyu, S. Inoue, T. Masuda, T. Hosaka, K. Tono, Y. Joti, T. Kameshima, T. Hatsui, M. Yabashi, T. Inoue, O. Nureki, S. Iwata, *M. Murata, *E. Mizohata, “Membrane Protein Structure Determination by SAD, SIR, or SIRAS



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Phasing in Serial Femtosecond Crystallography Using an Iododetergent” *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **113**, 13039, (2016), [10.1073/pnas.1602531113](https://doi.org/10.1073/pnas.1602531113)
63. K. Cornelio, R.A. Espiritu, Y. Todokoro, S. Hanashima, M. Kinoshita, N. Matsumori, *M. Murata, S. Nishimura, H. Kakeya, M. Yoshida, S. Matsunaga, “Sterol-dependent Membrane Association of the Marine Sponge-derived Bicyclic Peptide Theonellamide A as Examined by ¹H NMR” *Bioorg. Med. Chem.*, **24**, 5235, (2016), [10.1016/j.bmc.2016.08.043](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2016.08.043)
64. R.A. Espiritu, K. Cornelio, M. Kinoshita, *N. Matsumori, M. Murata, S. Nishimura, H. Kakeya, M. Yoshida, S. Matsunaga, “Marine Sponge Cyclic Peptide Theonellamide A Disrupts Lipid Bilayer Integrity without Forming Distinct Membrane Pores” *Biochim Biophys Acta Biomembranes*, **1858**, 1373, (2016), [10.1016/j.bbamem.2016.03.019](https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2016.03.019)
65. Y. Nakagawa, Y. Umegawa, N. Matsushita, T. Yamamoto, H. Tsuchikawa, S. Hanashima, T. Oishi, *N. Matsumori, *M. Murata, “The Structure of the Bimolecular Complex between Amphotericin B and Ergosterol in Membranes is Stabilized by Face-to-face Van Der Waals Interaction with their Rigid Cyclic Cores” *Biochemistry* **55**, 3392, (2016), [10.1021/acs.biochem.6b00193](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.6b00193)
66. O. Engberg, T. Yasuda, V. Hautala, N. Matsumori, T.K.M. Nyholm, *M. Murata, *J. P. Slotte, “Lipid interactions and organization in complex bilayer Membranes” *Biophys J*, **110**, 1563, (2016), [10.1016/j.bpj.2015.12.043](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2015.12.043)
67. Y. Umegawa, Y. Tanaka, N. Matsumori, *M. Murata, “¹³C-TmDOTA as Versatile Thermometer Compound for Solid-state NMR of Hydrated Lipid Bilayer Membranes”, *Magn Reson Chem.*, **54**, 227, (2016), [10.1002/mrc.4371](https://doi.org/10.1002/mrc.4371)
68. M. M. Islam, M. Yohda, S. I. Kidokoro, *Y. Kuroda, “Crystal Structures of Highly Simplified BPTIs Provide Insights into Hydration-driven Increase of Unfolding Enthalpy,” *Sci. Rep.*, **7**, 41205, (2017), [10.1038/srep41205](https://doi.org/10.1038/srep41205)
69. R. Sharma, Y. Ishimaru, I. Davison, K. Ikegami, M. S. Chien, H. You, Q. Chi, M. Kubota, M. Yohda, M. Ehlers, *H. Matsunami, “Olfactory Receptor Accessory Proteins Play Crucial Roles in Receptor Function and Gene Choice”, *Elife*, (2017) , in press, [10.7554/elife.21895](https://doi.org/10.7554/elife.21895)
70. Y. Fukutani, J. Ishii, A. Kondo, T. Ozawa, H. Matsunami, *M. Yohda, “Split Luciferase Complementation Assay for the Analysis of G Protein-coupled Receptor Ligand Response in *Saccharomyces cerevisiae*,” *Biotechnol. Bioeng.*, (2017), in press, [10.1002/bit.26255](https://doi.org/10.1002/bit.26255)
71. C. Sugimoto, K. Takeda, Y. Kariya, H. Matsumura, M. Yohda, H. Ohno, *N. Nakamura, “A method of Expression for an Oxygen-tolerant Group III Alcohol Dehydrogenase from *Pyrococcus horikoshii* OT3,” *J. Biol. Inorg. Chem.*, **22**, 527-534, (2017), [10.1007/s00775-017-1439-2](https://doi.org/10.1007/s00775-017-1439-2)
72. K. Hakamada, H. Watanabe, R. Kawano, K. Noguchi, *M. Yohda, “Expression and Characterization of the Plasmodium Translocon of the Exported Proteins Component EXP2,” *Biochem. Biophys. Res.*



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Commun.*, **482**, 700-705 (2017),
[10.1016/j.bbrc.2016.11.097](https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2016.11.097)
73. Y. Y. Yamamoto, K. Tsuchida, K. Noguchi, N. Ogawa, H. Sekiguchi, Y. C. Sasaki, *M. Yohda, “Characterization of Group II Chaperonins from an Acidothermophilic Archaeon *Picrophilus torridus*,” *FEBS Open Bio.*, **6**, 751-764, (2016),
[10.1002/2211-5463.12090](https://doi.org/10.1002/2211-5463.12090)
74. F. Watanabe, F. Yu, A. Ohtaki, Y. Yamanaka, K. Noguchi, M. Odaka, *M. Yohda, “Improvement of Enantioselectivity of the B-type Halohydrin Hydrogen-halide-lyase from *Corynebacterium* sp. N-1074,” *J. Biosci. Bioeng.*, **122**, 270-275, (2016),
[10.1016/j.jbiosc.2016.02.003](https://doi.org/10.1016/j.jbiosc.2016.02.003)
75. T. Aihara, T. Ito, Y. Yamanaka, K. Noguchi, M. Odaka, M. Sekine, H. Homma, *M. Yohda, “Structural and Functional Characterization of Aspartate Racemase from the Acidothermophilic Archaeon *Picrophilus torridus*,” *Extremophiles* **20**, 385-393, (2016),
[10.1007/s00792-016-0829-7](https://doi.org/10.1007/s00792-016-0829-7)
76. T. Zako, M. Sahlan, S. Fujii, Y. Y. Yamamoto, P. T. Tai, K. Sakai, M. Maeda M, *M. Yohda, “Contribution of the C-Terminal Region of a Group II Chaperonin to its Interaction with Prefoldin and Substrate Transfer,” *J. Mol. Biol.*, **428**, 2405-2417, (2016),
[10.1016/j.jmb.2016.04.006](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2016.04.006)
77. M. Kayanuma, M. Shoji, M. Yohda, M. Odaka, *Y. Shigeta, “Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase Subsequent to Cyclic Intermediate Formation: A QM/MM Study,” *J. Phys. Chem. B.*, **120**, 3259-3266, (2016),
[10.1021/acs.jpcb.5b11363](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.5b11363)
78. T. Mashiko, S. Hiraoka, U. Nagashima, *M. Tachikawa, “Theoretical Study on Substituent and Solvent Effects for Nanocubes Formed with Gear-shaped Amphiphile Molecules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 1627-1631, (2017), [10.1039/C6CP07754D](https://doi.org/10.1039/C6CP07754D)
79. V. E. Pritchard, D. R. Martir, S. Oldknow, S. Kai, S. Hiraoka, N. J. Cookson,*E. Zysman-Colman, *M. J. Hardie, “Homochiral Self-sorted and Emissive Ir^{III} metallo-cryptophanes”, *Chem. Eur. J.* **23**, (2017) , in press, [10.1002/chem.201701348](https://doi.org/10.1002/chem.201701348)
80. K. P. Huynh Nhat, T. Watanabe, K. Yoshikoshi, *T. Hohsaka, “Antibody-based Fluorescent and Fluorescent Ratiometric Indicators for Detection of Phosphotyrosine”, *J. Biosci. Bioeng.*, **122**, 146-154, (2016),
[10.1016/j.jbiosc.2016.01.010](https://doi.org/10.1016/j.jbiosc.2016.01.010)
81. K. Yoshikoshi, T. Watanabe, *T. Hohsaka, “Double-fluorescent-labeled Single-chain Antibodies Showing Antigen-dependent Fluorescence Ratio Change”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **89**, 573-580, (2016),
[10.1246/bcsj.20150384](https://doi.org/10.1246/bcsj.20150384)
82. K. Ikemoto, R. Kobayashi, S. Sato, *H. Isobe, “Entropy-Driven Ball-in-Bowl Assembly of Fullerene and Geodesic Phenylene Bowl”, *Org. Lett.*, **19** (9), 2362–2365, (2017),
[10.1021/acs.orglett.7b00899](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.7b00899)
83. G. Yan, T. Yamaguchi, T. Suzuki, S. Yanaka, S. Sato, M. Fujita, *K. Kato, “Hyper-assembly of Self-assembled Glycoclusters Mediated by Specific Carbohydrate-carbohydrate Interactions”, *Chem. Asian J.*, in press, (2017),



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- [10.1002/asia.201700202](https://doi.org/10.1002/asia.201700202)
84. *D. Fujita, Y. Ueda, S. Sato, N. Mizuno, T. Kumasaka, *M. Fujita, “Self-assembly of Tetraivalent Goldberg Polyhedra from 144 Small Components”, *Nature*, **540**, 563-566, (2016), [10.1038/nature20771](https://doi.org/10.1038/nature20771)
(News & Views 欄でハイライトされる)
85. D. Fujita, Y. Ueda, S. Sato, H. Yokoyama, N. Mizuno, T. Kumasaka, *M. Fujita, “Self-Assembly of M₃₀L₆₀ Icosidodecahedron”, *Chem.*, **1**, 91-101, (2016), [10.1016/j.chempr.2016.06.007](https://doi.org/10.1016/j.chempr.2016.06.007)
(Cover Picture に採用)
(Preview 欄でハイライトされる)
86. K. Ikemoto, R. Kobayashi, S. Sato, *H. Isobe, “Synthesis and Bowl-in-bowl Assembly of a Geodesic Phenylene Bowl”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, in press, (2017), [10.1002/anie.201702063](https://doi.org/10.1002/anie.201702063)
(Very Important Paper(VIP)に採用)
(Inside Back Cover Picture に採用)
87. *K. Z. Suzuki, T. Izumi, X. Zhang, A. Sugihara, S.-T. Pham, H. Taka, S. Sato, H. Isobe, S. Mizukami, “Room Temperature Magnetoresistance in an Organic Spin Valve with an Aromatic Hydrocarbon macrocycle”, *APL Mater.*, **5**, 046101, (2017), [10.1063/1.4979548](https://doi.org/10.1063/1.4979548)
88. Y. Suzuki, S. Ishida, S. Sato, H. Isobe, *T. Iwamoto, “An Isolable Potassium Salt of a Borasilene–Chloride Adduct”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 4593-4597, (2017), [10.1002/anie.201612545](https://doi.org/10.1002/anie.201612545)
89. T. Izumi, Y. Tian, K. Ikemoto, A. Yoshii, T. Koretsune, R. Arita, H. Kita, H. Taka, *S. Sato, *H. Isobe, “Efficient Blue Electroluminescence from a Single-Layer Organic Device Composed Solely of Hydrocarbons”, *Chem. Asian J.*, **12**, 730-733, (2017), [10.1002/asia.201700198](https://doi.org/10.1002/asia.201700198)
90. A. Yoshii, K. Ikemoto, T. Izumi, H. Kita, H. Taka, T. Koretsune, R. Arita, *S. Sato, *H. Isobe, “Structural Modulation of Macrocyclic Materials for Charge Carrier Transport Layers in Organic Light-Emitting Devices”, *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, **6**, M3065-M3067, (2017), [10.1149/2.0111706jss](https://doi.org/10.1149/2.0111706jss)
91. S. Kamata, S. Sato, *J. Wu, *H. Isobe, “Crystal Structure of 15-Bis-(4-tert-butylphenyl)-1,9-dimethylhaptazethrene”, *Acta Cryst.*, **E73**, 99-102, (2017), [10.1107/S2056989016020247](https://doi.org/10.1107/S2056989016020247)
92. Z. Sun, N. Miyamoto, S. Sato, *H. Tokuyama, *H. Isobe, “An Obtuse-Angled Corner Unit for Fluctuating Carbon Nanohoops”, *Chem. Asian J.*, **12**, 271-275, (2017), [10.1002/asia.201601614](https://doi.org/10.1002/asia.201601614)
93. M. Sato, H. Azuma, A. Daigaku, S. Sato, K. Takasu, K. Okano, *H. Tokuyama, “Total Synthesis of (-)-Histronicotoxin through a Stereoselective Radical Translocation-Cyclization Reaction”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 1087-1091, (2016), [10.1002/anie.201609941](https://doi.org/10.1002/anie.201609941)
94. T. Matsuno, S. Sato, A. Yokoyama, S. Kamata, *H. Isobe, “Self-Sorting of Two Hydrocarbon Receptors with One Carbonaceous Ligand”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 15339-15343, (2016), [10.1002/anie.201609444](https://doi.org/10.1002/anie.201609444)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

57-65, (2017), [10.1016/j.copbio.2017.01.001](https://doi.org/10.1016/j.copbio.2017.01.001)

95. P. Sarkar, Z. Sun, T. Tokuhira, M. Kotani, S. Sato, *H. Isobe, “Stereoisomerism in Nano hoops with Heterogeneous Biaryl Linkages of E/Z- and R/S-Geometries”, *ACS Cent. Sci.*, **2**, 740-747, (2016), [10.1021/acscentsci.6b00240](https://doi.org/10.1021/acscentsci.6b00240)
96. M. Kanto, S. Sato, N. Tsuda, *M. Sasaki, “Stereodivergent Synthesis and Configurational Assignment of the C1–C15 Segment of Amphirionin-5”, *J. Org. Chem.*, **81**, 9105-9121, (2016), [10.1021/acs.joc.6b01700](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b01700)
97. Z. Sun, T. Suenaga, P. Sarkar, S. Sato, M. Kotani, *H. Isobe, “Stereoisomerism, Crystal Structures, and Dynamics of Belt-shaped Cyclonaphthylenes”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **113**, 8109-8114, (2016), [10.1073/pnas.1606530113](https://doi.org/10.1073/pnas.1606530113)
(AIMResearch にハイライトされる)
(2016年6月28日 KEK 物構研トピックスにハイライトされる)
98. *S. Sato, A. Unemoto, T. Ikeda, *S. Orimo, *H. Isobe, “Carbon-rich Active Materials with Macrocyclic Nanochannels for High-Capacity Negative Electrodes in All-Solid-State Lithium Rechargeable Battery”, *Small*, **12**, 3381-3387, (2016), [10.1002/smll.201600916](https://doi.org/10.1002/smll.201600916)
(Back Cover Picture に採択)
(2016年9月26日 AIMResearch にハイライトされる)
99. N. Kobayashi, *R. Arai, “Design and Construction of Self-assembling Supramolecular Protein Complexes Using Artificial and Fusion Proteins as Nanoscale Building Blocks.” *Curr. Opin. Biotech.*, **46**,
100. #M. Baba, #K. Iwamoto, R. Iino, H. Ueno, M. Hara, A. Nakanishia, J. Kishikawa, *H. Noji, *K. Yokoyama (#Equal contribution), “Rotation of Artificial Rotor Axles in Rotary Molecular Motors”, *Proc Natl Acad Sci USA* **113**, 11214-11219, (2016), [10.1073/pnas.1605640113](https://doi.org/10.1073/pnas.1605640113)
101. A. Nakamura, T. Tasaki, D. Ishiwata, M. Yamamoto, Y. Okuni, A. Visootsat, M. Maximilien, H. Noji, T. Uchiyama, M. Samejima, K. Igarashi, *R. Iino, “Single-molecule Imaging Analysis of Binding, Processive Movement, and Dissociation of Cellobiohydrolase *Trichoderma reesei* Cel6A and its Domains on Crystalline Cellulose”, *J. Biol. Chem.*, **291**, 22404-22413, (2016), [10.1074/jbc.M116.752048](https://doi.org/10.1074/jbc.M116.752048)
(表紙に採用)
102. #H. Isojima, #R. Iino, Y. Niitani, H. Noji, *M. Tomishige (#Equal contribution), “Direct Observation of Intermediate States During the Stepping Motion of Kinesin-1”, *Nat Chem Biol.*, **12**, 290-297, (2016), [10.1038/nchembio.2028](https://doi.org/10.1038/nchembio.2028)
(News and Views で紹介)
103. *H. Abe, S. Takashima, *M. Inouye, “Kinetic Switching of Achirality/Chirality Memorization of meta-Ethynylpyridine Polymer by Coordination of Cu(II) Outside the Polymer”, *Heterocycles*, **95**, in press, [10.3987/COM-16-S\(S\)64](https://doi.org/10.3987/COM-16-S(S)64)
104. S. Hirokane, S. Takashima, *H. Abe, *M. Inouye, “Helix-Rotaxane Hybrid Systems: Rotaxane-Stabilized, Saccharide-Induced



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Chiral Ethynylpyridine Helices by a Thermodynamic Process”, *Eur. J. Org. Chem.*, 726–733, (2017), [10.1002/ejoc.201601323](https://doi.org/10.1002/ejoc.201601323)
105. *H. Abe, R. Yumoto, *M. Inouye, “A D_{3h} -Symmetric Macrocycle Alternatingly Composed of Pyridine and Benzyl Alcohol Units Linked with Acetylene Bonds”, *Heterocycles*, **93**, 580–592, (2016)
106. *H. Abe, T. Yoneda, Y. Ohishi, *M. Inouye, “ D_{3h} -Symmetrical Shape-Persistent Macrocycles Consisting of Pyridine-Acetylene-Phenol Conjugates as a Highly Efficient Host Architecture for Saccharide Recognition”, *Chem.–Eur. J.*, **22**, 18944–18952, (2016), [10.1002/chem.201603987](https://doi.org/10.1002/chem.201603987)
107. *M. Inouye, A. Yoshizawa, M. Shibata, Y. Yonenaga, K. Fujimoto, T. Sakata, S. Matsumoto, M. Shiro, “Cyclodextrin-Isolated Alkynylpyrenes as UV-Stable and Blue-Light-Emitting Molecules Even in Condensed States”, *Org. Lett.*, **18**, 1960–1963 (2016), [10.1021/acs.orglett.6b00420](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.6b00420)
108. B. Maity, S. Abe, and T. Ueno, “Observation of Gold Sub-nanocluster Nucleation Within a Crystalline Protein Cage”, *Nat. Commun.*, **8**, 14820, (2017), [10.1038/ncomms14820](https://doi.org/10.1038/ncomms14820)
109. S. Abe, H. Tabe, H. Ijiri, K. Yamashita, K. Hirata, K. Atsumi, T. Shimo, M. Akai, H. Mori, S. Kitagawa and T. Ueno*, “Crystal Engineering of Self-Assembled Porous Protein Materials in Living Cells”, *ACS Nano*, **11**, 2410-2419, (2017), [10.1021/acsnano.6b06099](https://doi.org/10.1021/acsnano.6b06099)
110. B. Maity, and T. Ueno, “Design of Bioinorganic Materials At the Interface of Coordination and Biosupramolecular Chemistry”, *Chem. Rec.*, **17**, 383–398, (2017), [10.1002/tcr.20160122](https://doi.org/10.1002/tcr.20160122)
(Front Cover に採用)
111. R. Akiyoshi, K. Kuroiwa, S. A. Amolegbe, M. Nakaya, R. Ohtani, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “Supramolecular Architectures Self-assembled Using Long Chain Alkylated Spin Crossover Cobalt(II) Compounds”, *Chem. Commun.*, *in press*, (2017), [10.1039/C7CC01501A](https://doi.org/10.1039/C7CC01501A)
112. M. Nakaya, R. Ohtani, K. Sugimoto, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “Molecular Assemblies of Metal Complexes via Base Pairing of Nucleic Acids in the Crystalline State”, *Chem. Eur. J.*, **23**, 7232–7237, (2017), [10.1002/chem.201700593](https://doi.org/10.1002/chem.201700593)
113. *R. Ohtani, Y. Kitamura, Y. Hijikata, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “Modulation of Redox Potentials Utilizing the Flexible Coordination Sphere of a Penta-coordinate Complex in the Solid States”, *Dalton Trans.*, **46**, 3749–3754, (2017), [10.1039/c7dt00233e](https://doi.org/10.1039/c7dt00233e)
114. *R. Ohtani, *S. Hayami, “Guest-dependent Spin-transition Behavior of Porous Coordination Polymers”, *Chem. Eur. J.*, **23**, 2236–2248, (2017), [10.1002/chem.201601880](https://doi.org/10.1002/chem.201601880)
115. Y. Sekimoto, M. R. Karim, N. Saigo, R. Ohtani, M. Nakamura, *S. Hayami, “Crystal Structures and Spin-Crossover Behavior of Iron(II) Complexes with Chiral and Racemic Ligands”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2017**, 1049–1053, (2017), [10.1002/ejic.201601232](https://doi.org/10.1002/ejic.201601232)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

(Front Cover に採用)

116. K. Wakata, M. R. Karim, M. S. Islam, R. Ohtani, M. Nakamura, M. Koinuma, *S. Hayami, “Superionic Conductivity in Hybrid of 3-hydroxypropanesulfonic Acid and Graphene Oxide”, *Chem. Asian J.*, **12**, 194-197, (2017), [10.1002/asia.201601488](https://doi.org/10.1002/asia.201601488)
117. H. Ohmagari, R. Ohtani, M. Nakaya, M. Ohba, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “Water-Dependent Charge-transfer-induced Spin Transition of a Prussian Blue Analog”, *Dalton Trans.*, **45**, 16784-16788, (2016), [10.1039/C6DT03474H](https://doi.org/10.1039/C6DT03474H)
118. K. Kasho, H. Tanaka, R. Sakai, *T. Katayama, “Cooperative DnaA Binding to the Negatively Supercoiled datA Locus Stimulates DnaA-ATP Hydrolysis”, *J. Biol. Chem.*, **292**, 1251-1266, (2017), [10.1074/jbc.M116.762815](https://doi.org/10.1074/jbc.M116.762815)
119. M. Shimizu, Y. Noguchi, Y. Sakiyama, H. Kawakami, *T. Katayama, *S. Takada, “Near-atomic Structural model for Bacterial DNA Replication Initiation Complex and its Functional Insights”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **113**, E8021-E8030, (2016), [10.1073/pnas.1609649113](https://doi.org/10.1073/pnas.1609649113)
120. Y. Inoue, H. Tanaka, K. Kasho, K. Fujimitsu, T. Oshima, *T. Katayama, “Chromosomal Location of the DnaA-reactivating Sequence DARS2 is Important to Regulate Timely Initiation of DNA Replication in Escherichia Coli”, *Genes Cells.*, **21**, 1015-1023, (2016), [10.1111/gtc.12395](https://doi.org/10.1111/gtc.12395)
121. Y. Nakasone, H. Ooi, Y. Kamiya, H. Asanuma, *M. Terazima “Dynamics of
- Inter-DNA Chain Interaction of Photoresponsive DNA”, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 9001, (2016), [10.1021/jacs.6b02525](https://doi.org/10.1021/jacs.6b02525)
122. *H. Asanuma, R. Niwa, M. Akahane, K. Murayama, H. Kashida, Y. Kamiya, “Strand-invading Linear Probe Combined with Unmodified PNA”, *Bioorg. Med. Chem.*, **24**, 4129, (2016), [10.1016/j.bmc.2016.06.055](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2016.06.055)
123. M. Endo, T. Fukui, S. H. Jung, S. Yagai, M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, “Photoregulated Living Supramolecular Polymerization of Established by Combining Energy Landscapes of Photoisomerization and Nucleation-elongation Processes”, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 14347, (2016), [10.1021/jacs.6b08145](https://doi.org/10.1021/jacs.6b08145)
124. T. Fukui, S. Kawai, S. Fujinuma, Y. Matsushita, T. Yasuda, T. Sakurai, S. Seki, M. *Takeuchi, *K. Sugiyasu, “Control over Differentiation of a Metastable Supramolecular Assembly in One and Two Dimensions” *Nature Chem.*, **9**, 493-499, (2017), [10.1038/NCHEM.2684](https://doi.org/10.1038/NCHEM.2684)
125. T. Fukui, *M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, “Impact of a Subtle Structural Difference on the Kinetic Behavior of Metastable Supramolecular Assemblies” *Polymer*; in press, [10.1016/j.polymer.2016.12.027](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2016.12.027)
126. T. Fukui, *M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, “Autocatalytic Time-Dependent Evolution of Metastable Two-Component Supramolecular Assemblies to Self-Sorted or Coassembled State” *Sci. Rep.*, in press, [10.1038/s41598-017-02524-3](https://doi.org/10.1038/s41598-017-02524-3)
127. *D. Suzuki, C. Kobayashi, “Raspberry-shaped



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Composite Microgel Synthesis by Seeded Emulsion Polymerization with Hydrogel Particles”, *Langmuir*, **30**, 7085-7092, (2014), [10.1021/la5017752](https://doi.org/10.1021/la5017752)
128. S. Matsui, T. Kureha, Y. Nagase, K. Okeyoshi, R. Yoshida, T. Sato, *D. Suzuki, “Small-angle X-ray Scattering Study on Internal Microscopic Structures of Poly(N-isopropylacrylamide-co-tris(2,2'-bipyridyl))ruthenium(II) Complex Microgels”, *Langmuir*, **31**, 7228-7237, (2015), [10.1021/acs.langmuir.5b01164](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b01164)
129. C. Kobayashi, T. Watanabe, K. Murata, T. Kureha, *D. Suzuki, “Localization of Polystyrene Particles on the Surface of Poly(N-isopropylacrylamide-co-methacrylic acid) Microgels Prepared by Seeded Emulsion Polymerization of Styrene”, *Langmuir*, **32**, 1429-1439, (2016), [10.1021/acs.langmuir.5b03698](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b03698)
130. S. Minami, T. Watanabe, *D. Suzuki, *K. Urayama, “Rheological Properties of Suspensions of Thermo-responsive Poly(N-isopropylacrylamide) Microgels Undergoing Volume Phase Transition”, *Polym. J.*, **48**, 1079-1086, (2016), [10.1038/pj.2016.79](https://doi.org/10.1038/pj.2016.79)
131. T. Watanabe, C. Kobayashi, C. Song, K. Murata, T. Kureha, *D. Suzuki, “Impact of Spatial Distribution of Charged Groups in Core Poly(N-isopropyl acrylamide)-Based Microgels on the Resultant Composite Structures Prepared by Seeded Emulsion Polymerization of Styrene”, *Langmuir*, **32**, 12760-12773, (2016), [10.1021/acs.langmuir.6b03172](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b03172)
132. T. Kureha, S. Hiroshige, S. Matsui, *D. Suzuki, “Water-immiscible Bioinert Coatings and Film Formation from Aqueous Dispersions of poly(2-methoxyethyl acrylate)Microspheres”, *Colloids Surf. B*, **155**, 166-172, (2017), [10.1016/j.colsurfb.2017.04.001](https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2017.04.001)
133. A. Oku, M. Imanishi, D. Noshiro, T. Murayama, T. Takeuchi, I. Nakase, *S. Futaki, “Use of Calmodulin EF-hand Peptides as Ca²⁺-switchable Recognition Tags”, *Biopolymers, Pept. Sci.*, **108**(1), in press, (2017), [10.1002/bip.22937](https://doi.org/10.1002/bip.22937)
134. *T. Matsuura, N. Tanimura, K. Hosoda, Y. Yomo, Y. Shimizu, “Reaction Dynamics Analysis of a Reconstituted *Escherichia coli* Protein Translation System by Computational Modeling”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A*, **114**, E1336-E1344, (2017), [10.1073/pnas.1615351114](https://doi.org/10.1073/pnas.1615351114)
135. A. Uyeda, S. Nakayama, Y. Kato, H. Watanabe, T. *Matsuura, (2016), “Construction of an *in vitro* Gene Screening System of the *E. coli* EmrE Transporter Using Liposome Display”, *Anal. Chem.*, **88**, 12028-12035, [10.1021/acs.analchem.6b02308](https://doi.org/10.1021/acs.analchem.6b02308)
136. N. Ohta, Y. Kato, H. Watanabe, H. Mori, *T. Matsuura, (2016), “*In vitro* Membrane Protein Synthesis Inside Sec Translocon-reconstituted Cell-sized Liposomes”, *Sci. Rep.*, **6**, 36466, [10.1038/srep36466](https://doi.org/10.1038/srep36466)
137. A. Uyeda, T. Watanabe, Y. Kato, H. Watanabe, T. Yomo, T. Hohsaka, *T. Matsuura, “Liposome-based *in vitro* Evolution of



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Aminoacyl-tRNA Synthetase for Enhanced Pyrrolysine Derivative Incorporation”, *Chembiochem.* **16**, 1797-802, (2015), [10.1002/cbic.201500174](https://doi.org/10.1002/cbic.201500174)
138. T. Sagami, Y. O. Tahara, M. Miyata, H. Miyake, *S. Shinoda, “Luminescence Sensing of Weakly-Hydrated Anions in Aqueous Solution by Self-assembled Europium(III) Complexes”, *Chem. Commun.*, **53**, 3967-3970, (2017), [10.1039/C7CC00477J](https://doi.org/10.1039/C7CC00477J)
139. T. Sagami, S. Umemoto, Y. O. Tahara, M. Miyata, Y. Yonamine, D. Ishikawa, T. Mori, K. Ariga, H. Miyake, *S. Shinoda, “pH-Responsive Cotton Effects in the d-d Transition Band of Self-Assembling Copper(II) Complexes with a Cholestryl-armed Ligand”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, in press, (2017), [10.1246/bcsj.20170054](https://doi.org/10.1246/bcsj.20170054)
140. S. Ito, S. Irle, Y. Okamoto, “Implementation of Replica-exchange Umbrella Sampling in the DFTB+ Semiempirical Quantum Chemistry Package”, *Comput. Phys. Commun.*, **204**, 1-10, (2016), [10.1016/j.cpc.2016.02.010](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.02.010)
141. G. La Penna, Y. Mori, R. Kitahara, K. Akasaka, Y. Okamoto, “Modeling ¹⁵N NMR Chemical Shift Changes in Protein Backbone with Pressure”, *J. Chem. Phys.*, **145**, 085104 (12 pages), (2016), [10.1063/1.4961507](https://doi.org/10.1063/1.4961507)
142. 榎慶丈, 西川直宏, 塚本修一朗, 鈴木孝禎, 岡本祐幸, “分子動力学シミュレーションによる医学・創薬に向けたタンパク質の構造解析”, *YAKUGAKU ZASSHI* **136**, 113-120, (2016), [10.1248/yakushi.15-00230-4](https://doi.org/10.1248/yakushi.15-00230-4)
143. 岡本祐幸, 卷頭言 : 計算生物物理学の将来, 生物物理 (日本生物物理学会誌) , 56 卷, 75, (2016), [10.2142/biophys.56.075](https://doi.org/10.2142/biophys.56.075)
144. X. Lu, D. Fang, S. Ito, Y. Okamoto, V. Ovchinnikov, Q. Cui, “QM/MM Free Energy Simulations: Recent Progress and Challenges”, *Molecular Simulation*, **42**, 1056-1078, (2016), [10.1080/08927022.2015.1132317](https://doi.org/10.1080/08927022.2015.1132317)
145. Y. Higashiguchi, K. Katsuta, T. Minegishi, S. Yonemura, A. Urasaki, *N. Inagaki, “Identification of a Shootin1 Isoform Expressed in Peripheral Tissues”, *Cell Tissue Res.*, **366**, 75-87, (2016), [10.1007/s00441-016-2415-9](https://doi.org/10.1007/s00441-016-2415-9)
146. *N. Inagaki, H. Katsuno, “Actin Waves: Origin of Cell Polarization and Migration?” *Trends Cell Biol.*, **27**, 515-526, (2017), [10.1016/j.tcb.2017.02.003](https://doi.org/10.1016/j.tcb.2017.02.003)
147. E. Krayukhina, M. Noda, K. Ishii, T. Maruno, H. Wakabayashi, M. Tada, T. Suzuki, A. Ishii-Watabe, M. Kato, *S. Uchiyama, “Analytical Ultracentrifugation with Fluorescence Detection System Reveals Differences in Complex Formation between Recombinant Human TNF and Different Biological TNF Antagonists in Various Environments”, *MAbs.*, **9**, 664-679, (2017), [10.1080/19420862.2017.1297909](https://doi.org/10.1080/19420862.2017.1297909)
148. Z. Zhang, U. Ohto, T. Shibata, E. Krayukhina, M. Taoka, Y. Yamauchi, H. Tanji, T. Isobe, S. Uchiyama, K. Miyake, *T. Shimizu, “Structural Analysis Reveals that Toll-like Receptor 7 Is a Dual Receptor for Guanosine and Single-Stranded RNA”, *Immunity*, **45**, 737-748, (2016), [10.1016/j.immuni.2016.09.011](https://doi.org/10.1016/j.immuni.2016.09.011)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

149. S. Toma-Fukai, J. D. Kim, K. E. Park, N. Kuwabara, N. Shimizu, E. Krayukhina, S. Uchiyama, A. Fukamizu, *T. Shimizu, “Novel Helical Assembly in Arginine Methyltransferase 8,” *J. Mol. Biol.*, **428**, 1197-1208, (2016), [10.1016/j.jmb.2016.02.007](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2016.02.007)
150. *M. Sugiyama, H. Yagi, K. Ishii, L. Porcar, A. Martel, K. Oyama, M. Noda, Y. Yunoki, R. Murakami, R. Inoue, N. Sato, Y. Oba, K. Terauchi, S. Uchiyama, *K. Kato, “Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast-matching Small-angle Neutron Scattering,” *Sci Rep.*, **6**, 35567, (2016), [10.1038/srep35567](https://doi.org/10.1038/srep35567)
151. S. Seetaha, M. Yagi-Utsumi, T. Yamaguchi, K. Ishii, S. Hannongbua, *K. Choowongkomon, *K. Kato, “Application of Site-Specific Spin Labeling for NMR Detecting Inhibitor-Induced Conformational Change of HIV-1 Reverse Transcriptase,” *ChemMedChem*. **11**, 363-366, (2016), [10.1002/cmdc.201500554](https://doi.org/10.1002/cmdc.201500554)
152. *T. Satoh, T. Toshimori, M. Noda, S. Uchiyama, *K. Kato, “Interaction Mode between Catalytic and Regulatory Subunits in Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control,” *Protein Sci.*, **25**, 2095-2101, (2016), [10.1002/pro.3031](https://doi.org/10.1002/pro.3031)
153. R. Phengchat, *H. Takata, K. Morii, N. Inada, H. Murakoshi, S. Uchiyama, *K. Fukui, “Calcium Ions Function as a Booster of Chromosome Condensation,” *Sci. Rep.*, **6**, 38281, (2016), [10.1038/srep38281](https://doi.org/10.1038/srep38281)
154. *U. Ohto, H. Ishida, E. Krayukhina, S. Uchiyama, N. Inoue, *T. Shimizu, “Structure of IZUMO1-JUNO Reveals Sperm-oocyte Recognition During Mammalian Fertilization”, *Nature*, **534**, 566-569, (2016), [10.1038/nature18596](https://doi.org/10.1038/nature18596)
155. *M. Oda, Y. Tanabe, M. Noda, S. Inaba, E. Krayukhina, H. Fukada, S. Uchiyama, “Structural and Binding Properties of Laminarin Revealed by Analytical Ultracentrifugation and Calorimetric Analyses”, *Carbohydr Res.*, **431**, 33-38, (2016), [10.1016/j.carres.2016.05.008](https://doi.org/10.1016/j.carres.2016.05.008)
156. E. Nango, S. Akiyama, S. Maki-Yonekura, Y. Ashikawa, Y. Kusakabe, E. Krayukhina, T. Maruno, S. Uchiyama, N. Nuemket, K. Yonekura, M. Shimizu, N. Atsumi, N. Yasui, T. Hikima, M. Yamamoto, Y. Kobayashi, *A. Yamashita, “Taste Substance Binding Elicits Conformational Change of Taste Receptor T1r Heterodimer Extracellular Domains,” *Sci Rep.*, **6**, 25745, (2016), [10.1038/srep25745](https://doi.org/10.1038/srep25745)
157. A. Masato, F. Kiichi, *S. Uchiyama, “Suppression of Methionine Oxidation of a Pharmaceutical Antibody Stored in a Polymer-Based Syringe,” *J Pharm. Sci.*, **105**, 623-629, (2016), [10.1002/jps.24675](https://doi.org/10.1002/jps.24675)
158. *Y. Kabe, T. Nakane, I. Koike, T. Yamamoto, Y. Sugiura, E. Harada, K. Sugase, T. Shimamura, M. Ohmura, K. Muraoka, A. Yamamoto, T. Uchida, S. Iwata, Y. Yamaguchi, E. Krayukhina, M. Noda, H. Handa, K. Ishimori, S. Uchiyama, *T. Kobayashi, *M. Suematsu, “Haem-dependent Dimerization of PGRMC1/Sigma-2 Receptor Facilitates Cancer Proliferation and Chemoresistance,” *Nat. Commun.*, **7**, 11030,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- (2016), [10.1038/ncomms11030](https://doi.org/10.1038/ncomms11030)
159. *R. Inoue, T. Takata, N. Fujii, K. Ishii, S. Uchiyama, N. Sato, Y. Oba, K. Wood, K. Kato, N. Fujii, *M. Sugiyama, ‘New Insight into the Dynamical System of AlphaB-crystallin Oligomers,’ *Sci Rep.*, **6**, 29208, (2016), [10.1038/srep29208](https://doi.org/10.1038/srep29208)
160. S. Uchiyama, ‘Biophysical Characterization of Biopharmaceuticals, Including Antibody Drugs’, *Yakugaku Zasshi*, **136**, 443-448, (2016), [10.1248/yakushi.15-00236-2](https://doi.org/10.1248/yakushi.15-00236-2)
161. Y. Matsuki, M. Iwamoto, K. Mita, K. Shigemi, S. Matsunaga, *S. Oiki, ‘Rectified Proton Grotthuss Conduction Across a Long Water-Wire in the Test Nanotube of the Polytheonamide B Channel’, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, (12), 4168-4177, (2016), [10.1021/jacs.5b13377](https://doi.org/10.1021/jacs.5b13377)
(ACS Select: Nanoreactors に選出)
162. T. Sumikama, *S. Oiki, ‘Digitalized K⁺ Occupancy in the Nanocavity Holds and Releases Queues of K⁺ in a Channel’, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 10284-10292, (2016), [10.1021/jacs.6b05270](https://doi.org/10.1021/jacs.6b05270)
163. A. Sumino, T. Uchihashi, *S. Oiki, ‘Oriented Reconstitution of the Full-length KcsA Potassium Channel in a Lipid Bilayer for AFM Imaging’, *J. Phys. Chem. Lett.*, **8**, 785-793, (2017), [10.1021/acs.jpclett.6b03058](https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.6b03058)
164. *H. Okumura, S. G. Itoh, ‘Structural and Fluctuational Difference between Two Eds of Aβ Amyloid Fibril: MD Simulation Predicts Only One End has Open Conformations’, *Sci. Rep.*, **6**, 38422, (2016), [10.1038/srep38422](https://doi.org/10.1038/srep38422)
165. R. Gupta, *S. Saito, Y. Mori, S. G. Itoh, H. Okumura, *M. Tominaga, ‘Structural Basis of TRPA1 Inhibition by HC-030031 Utilizing Species-specific Differences’, *Sci. Rep.*, **6**, 37460, (2016), [10.1038/srep37460](https://doi.org/10.1038/srep37460)
166. H. Nishizawa, *H. Okumura, ‘Rapid QM/MM Approach for Biomolecular Systems Under Periodic Boundary Conditions: Combination of the Density-functional Tight-binding Theory and Particle Mesh Ewald Method’, *J. Comput. Chem.*, **37**, 2701-2711, (2016), [10.1002/jcc.24497](https://doi.org/10.1002/jcc.24497)
(カバーイラストレーションに採用)
167. S. G. Itoh, *H. Okumura, ‘Oligomer Formation of Amyloid-β(29-42) from its Monomers Using the Hamiltonian Replica-permutation Molecular Dynamics Simulation’, *J. Phys. Chem. B*, **120**, 6555-6561, (2016), [10.1021/acs.jpcb.6b03828](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b03828)
168. *伊藤暁, *奥村久士：「レア・イベントを捕えるための新たな分子シミュレーション手法—アミロイド線維形成の理解に向けた取り組み—」 日本物理学会誌 71 (2016) 463.
169. S. Mizukami, M. Kashibe, K. Matsumoto, Y. Hori, *K. Kikuchi, ‘Enzyme-triggered Compound Release Using Functionalized Antimicrobial Peptide Derivatives’, *Chem. Sci.*, **8**, 3047-3052, (2017), [10.1039/C6SC04435B](https://doi.org/10.1039/C6SC04435B)
170. S. Hirayama, Y. Hori, Z. Benedek, T. Suzuki, *K. Kikuchi, ‘Fluorogenic Probes Reveal a Role of GLUT4 N-glycosylation in Intracellular Trafficking’, *Nat. Chem. Biol.*, **12**, 853-859, (2016), [10.1038/nchembio.2156](https://doi.org/10.1038/nchembio.2156)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

[10.1016/j.celrep.2016.07.047](https://doi.org/10.1016/j.celrep.2016.07.047)

171. H. Maeda, T. Kowada, J. Kikuta, M. Furuya, M. Shirazaki, S. Mizukami, M. Ishii, *K. Kikuchi, “Real-time Intravital Imaging of pH Variation Associated with Osteoclast Activity and Motility Using Designed Small Molecular Probe”, *Nat. Chem. Biol.*, **12**, 579-585, (2016), [10.1038/nchembio.2096](https://doi.org/10.1038/nchembio.2096)
172. S. Sotoma, J. Iimura, R. Igarashi, K.M. Hirosawa, H. Ohnishi, S. Mizukami, K. Kikuchi, T.K. Fujiwara, *M. Shirakawa, *H. Tochio, “Selective Labeling of Proteins on Living Cell Membranes Using Fluorescent Nanodiamond Probes”, *Nanomaterials*, **6**, 56, 9p (2016), [10.3390/nano6040056](https://doi.org/10.3390/nano6040056)
173. T. Wasin, K. Enomoto, T. Sakurai, V. Padalkar, H. Cheng, M. Tang, A. Horio, D., Sakamaki, M. Omichi, A. Saeki, K. Kikuchi, Y. Hori, A. Chiba, Y. Saito, T. Kamiya, M. Sugimoto, *S. Seki, “Fabrication of ‘Clickable’ Polyfluorene Nanowires with High Aspect Ratio as Biological Sensing Platforms”, *ACS Sensors*, **6**, 766-774, (2016), [10.1021/acssensors.6b00070](https://doi.org/10.1021/acssensors.6b00070)
174. M. Minoshima, and *K. Kikuchi, “Photostable and Photoswitching Fluorescent Dyes for Super-resolution Imaging”, *J. Biol. Inorg. Chem.*, in press, (2017), [10.1007/s00775-016-1435-y](https://doi.org/10.1007/s00775-016-1435-y)
175. *Y. Arata, M. Hiroshima, C.-G. Pack, R. Ramanujam, F. Motegi, K. Nakazato, P. W. Wiseman, H. Sawa, T. J. Kobayashi, H. B. Brandão, T. Shibata, *Y. Sako, “Cortical Polarity of the RING Protein PAR-2 is Maintained by Exchange Rate Kinetics at the Cortical-cytoplasm Boundary”, *Cell Rep.* **16**, 2156-2168, (2016),
176. *K. Okamoto, Y. Sako, “Recent Advances in FRET for the Study of Protein Interactions and Dynamics,” *Curr. Opin. Struct. Biol.* **46**, 16-23, (2017), [10.1016/j.sbi.2017.03.010](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2017.03.010)
177. 新土優樹、小迫英尊、佐甲靖志、高橋恒一, “細胞内シグナルのアナログ・デジタル変換” *生物物理* **56**, 334, (2016), [10.2149/biophys.56.334](https://doi.org/10.2149/biophys.56.334)
178. Y. Tanaka, N. Ono, T. Shima, G. Tanaka, Y. Katoh, K. Nakayama, H. Takatsu, *H.-W. Shin, “The Phospholipid Flippase ATP9A is Required for Recycling Pathway from Endosomes to the Plasma Membrane”, *Mol. Biol. Cell.* **27**, 3883, (2016), [10.1091/mbc.E16-08-0586](https://doi.org/10.1091/mbc.E16-08-0586)
Selected for highlights
179. R. Miyano, T. Matsumoto, H. Takatsu, K. Nakayama, *H.-W. Shin, “Alteration of Transbilayer Phospholipid Compositions is Involved in Cell Adhesion, Cell Spreading, and Focal Adhesion Formation”, *FEBS Lett.*, **590**, 2138, (2016), [10.1002/1873-3468.12247](https://doi.org/10.1002/1873-3468.12247)
180. A. Hanai, M. Ohgi, C. Yagi, T. Ueda, H.-W. Shin, *K. Nakayama, “Class I Arfs (Arf1 and Arf3) and Arf6 are Localized to the Flemming Body and Play Important Roles in Cytokinesis”, *J. Biochem.*, **159**, 201, (2016), [10.1093/jb/mvv088](https://doi.org/10.1093/jb/mvv088)
181. H. Yoke, *C. Shingyoji, “Effects of External Strain on the Regulation of Microtubule Sliding Induced by Outer arm Dynein of Sea Urchin Sperm Flagella”, *J. Exp. Biology*, 1122-1134, (2017), [10.1242/jeb.147942](https://doi.org/10.1242/jeb.147942)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

182. *M. Sugiyama, H. Yagi, K. Ishii, L. Porcar, A. Martel, K. Oyama, M. Noda, Y. Yunoki, R. Murakami, R. Inoue, N. Sato, Y. Oba, K. Terauchi, S. Uchiyama, *K. Kato, “Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast-matching Small-angle Neutron Scattering”, *Sci Rep.*, **6**, 35567, (2016), [10.1038/srep35567](https://doi.org/10.1038/srep35567)
183. E. Hibino, R. Inoue, M. Sugiyama, J. Kuwahara, K. Matsuzaki, and *M. Hoshino, “Interaction between Intrinsically Disordered Regions in Transcription Factors Sp1 and TAF4”, *Protein Sci.*, **25**, 2006-2017, (2016), [10.1002/pro.3013](https://doi.org/10.1002/pro.3013)
184. R. Inoue, T. Takata, N. Fujii, K. Ishii, S. Uchiyama, N. Sato, Y. Oba, K. Wood, K. Kato, N. Fujii, and *M. Sugiyama, “New Insight into the Dynamical System of α B-crystallin Oligomers”, *Sci Rep.*, **6**, 29208, (2016), [10.1038/srep29208](https://doi.org/10.1038/srep29208)
185. M. Chen, S. Asai, S. Narai, S. Nambu, N. Omura, Y. Sakaguchi, T. Suzuki, M. Ikeda-Saito, K. Watanabe, M. Yao, *N. Shigi, Y. Tanaka, “Biochemical and Structural Characterization of Oxygen-sensitive 2-thiouridine Synthesis Catalyzed by the Iron-sulfur Protein TtuA”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, in press, (2017), [10.1073/pnas.1615585114](https://doi.org/10.1073/pnas.1615585114)
186. Y. Miyabe, T. Furuta, T. Takeda, G. Kanno, T. Shimizu, Y. Tanaka, Z. Gai, H. Yasui, *H. Kishimura, “Structural Properties of Phycoerythrin from Dulse *Palmaria Palmate*”, *J. Food Biochem.*, **41**, e12301, (2017), [10.1111/jfbc.12301](https://doi.org/10.1111/jfbc.12301)
187. M. Chen, S. Narai, N. Omura, N. Shigi, S. Chimnaronk, *Y. Tanaka, M. Yao, “Crystallographic Study of Two-Thiouridine Synthetic Complex TtuA-TtuB from Thermus thermophiles”, *Acta Crystallogr. F.*, **72**, 777-781, (2016), [10.1107/S2053230X16014242](https://doi.org/10.1107/S2053230X16014242)
188. K. Oshima, Y. Kakiuchi, Y. Tanaka, T. Ueda, T. Nakashima, *M. Kimura, M. Yao, “Structural Basis for Recognition of a Kink-turn Motif by an Archaeal Homologue of Human RNase P Protein Rpp38”, *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **474**, 541-546, (2016), [10.1016/j.bbrc.2016.04.118](https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2016.04.118)
189. K. Oyama, C. Azai, K. Nakamura, S. Tanaka, *K. Terauchi, “Conversion between Two Conformational States of KaiC is Induced by ATP Hydrolysis as a Trigger for Cyanobacterial Circadian Oscillation” *Sci. Rep.* **6**, 32443, (2016), [10.1038/srep32443](https://doi.org/10.1038/srep32443)
190. M. Sugiyama, H. Yagi, K. Ishii, L. Porcar, A. Martel, K. Oyama, M. Noda, Y. Yunoki, R. Murakami, R. Inoue, N. Sato, Y. Oba, K. Terauchi, S. Uchiyama, *K. Kato, “Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast Matching Small-angle Neutron Scattering”, *Sci. Rep.*, **6**, 35567, (2016), [10.1038/srep35567](https://doi.org/10.1038/srep35567)
191. K. Terauchi, R. Sobue, Y. Furutani, R. Aoki, *Y. Fujita, “Isolation of Cyanobacterial Mutants Exhibiting Growth Defects under Microoxic Conditions by Transposon Tagging Mutagenesis of *Synechocystis* sp. PCC 6803.” *J. Gen. Appl. Microbiol.*, **63**, 131-138, (2017), [10.2323/jgam.2016.08.004](https://doi.org/10.2323/jgam.2016.08.004)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

192. R. Morita, M. Kihara, Y. Nakatsu, Y. Nomoto, M. Ogawa, K. Ohashi, K. Mizuno, T. Tachikawa, Y. Ishimoto, Y. Morishita, *T. Tsuji, “Coordination of Cellular Dynamics Contributes to Tooth Epithelium Deformations,” *PLoS One*, **11**, e0161336, (2016), [10.1371/journal.pone.0161336](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0161336) 着の機能,”*生化学* 88, 443-451 (2016)
193. G. Konotop, E. Bausch, T. Nagai, A. Turchinovich, N. Becker, A. Benner, M. Boutros, K. Mizuno, *A. Krämer, M. S. Raab, “Pharmacological Inhibition of Centrosome Clustering by Slingshot-Mediated Cofilin Activation and Actin Cortex Destabilization,” *Cancer Res.*, **76**, 6690-6700, (2016), [10.1158/0008-5472.CAN-16-1144](https://doi.org/10.1158/0008-5472.CAN-16-1144)
194. K. Takahashi, H. Okabe, S. Kanno, T. Nagai, *K. Mizuno, “A Pleckstrin Homology-like Domain is Critical for F-actin Binding and Cofilin-phosphatase Activity of Slingshot-1”, *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **482**, 686-692, (2017), [10.1016/j.bbrc.2016.11.095](https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2016.11.095)
195. *K. Ohashi, S. Fujiwara, K. Mizuno, “Roles of the Cytoskeleton, Cell Adhesion and Rho Signaling in Mechanosensing and Mechanotransduction,” *J. Biochem.*, **161**, 245-254, (2017), [10.1093/jb/mvw082](https://doi.org/10.1093/jb/mvw082) (表紙に採用)
196. S. Fujiwara, *K. Mizuno, “Role of Intermediate Filaments in Cell Locomotion,” Encyclopedia of Life Sciences (eLS), in press, (2017),
197. 藤原佐知子,大橋一正,水野健作
“メカノセンシングにおける細胞骨格、細胞接
198. C. Song, K. Murata, T. Suzaki, “Intracellular Symbiosis of Algae with Possible Involvement of Mitochondrial Dynamics”, *Sci. Rep.*, **7**, 1221, (2017), [10.1038/s41598-017-01331-0](https://doi.org/10.1038/s41598-017-01331-0)
199. K. Murata, Q. Zhang, JG. Galaz-Montoya, C. Fu, ML. Coleman, MS. Osburne, MF. Schmid, MB. Sullivan, SW. Chisholm, W. Chiu, “Visualizing Adsorption of Cyanophage P-SSP7 onto Marine Prochlorococcus”, *Sci. Rep.*, **7**, 44176, (2017), [10.1038/srep44176](https://doi.org/10.1038/srep44176)
200. K. Ichimura, S. Kakuta, Y. Kawasaki, T. Miyaki, T. Nonami, N. Miyazaki, T. Nakao, S. Enomoto, S. Arai, M. Koike, K. Murata, T. Sakai, “Morphological Process of Podocyte Development Revealed by Block-face Scanning Electron Microscopy”, *J. Cell Sci.*, **130**, 132–142, (2016), [10.1242/jcs.187815](https://doi.org/10.1242/jcs.187815)
201. T. Watanabe, C. Kobayashi, C. Song, K. Murata, T. Kureha, D. Suzuki D, “Impact of Spatial Distribution of Charged Groups in Core Poly(N - isopropylacrylamide)-Based Microgels on the Resultant Composite Structures Prepared by Seeded Emulsion Polymerization of Styrene”, *Langmuir*, **32**, 12760–12773, (2016), [10.1021/acs.langmuir.6b03172](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b03172)
202. *K. Murata, S. Hagiwara, Y. Kimori, *Y. Kaneko, “Ultrastructure of Compacted DNA in Cyanobacteria by High-voltage Cryo-electron Tomography”, *Sci. Rep.*, **6**, 34934, (2016), [10.1038/srep34934](https://doi.org/10.1038/srep34934)
203. K. Haga, A. Fujimoto, R. Takai-Todaka, M. Miki, YH. Doan, K. Murakami, M.



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Yokoyama, K. Murata, A. Nakanishi, K. Katayama, “Functional Receptor Molecules CD300lf and CD300ld Within the CD300 Family Enable Murine Noroviruses to Infect Cells”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **113**(41), E6248–E6255, (2016),
[10.1073/pnas.1605575113](https://doi.org/10.1073/pnas.1605575113)
204. *K. Okamoto, N. Miyazaki, DS. Larsson, D. Kobayashi, M. Svenda, K. Mühlig, FR. Maia, LH. Gunn, H. Isawa, M. Kobayashi, K. Sawabe, *K. Murata, J. Hajdu, “The Infectious Particle of Insectborne Totivirus-like Omono River Virus has Raised Ridges and Lacks Fibre Complexes”, *Sci. Rep.*, **6**, 33170, (2016), [10.1038/srep33170](https://doi.org/10.1038/srep33170)
205. T. Negishi, N. Miyazaki, K. Murata, H. Yasuo, N. Ueno, “Physical Association between a Novel Plasma-membrane Structure and Centrosome Orients Cell Division”, *eLife*, **5**, e16550, (2016), [10.7554/eLife.16550](https://doi.org/10.7554/eLife.16550)
206. M. Yamaguchi, H. Yamada, K. Higuchi, Y. Yamamoto, S. Arai, K. Murata, Y. Mori, H. Furukawa, MS, Uddin, H. Chibana, “High-voltage Electron Microscopy Tomography and Structome Analysis of Unique Spiral Bacteria from the Deep Sea”, *Microscopy*, **65**, 363–369, (2016),
[10.1093/jmicro/dfw016](https://doi.org/10.1093/jmicro/dfw016)
207. M. Takeuchi, I. Karahara, N. Kajimura, A. Takaoka, K. Murata, K. Misaki, S. Yonemura, LA, Staehelin, Y. Mineyuki, “Single Microfilaments Mediate the Early Steps of Microtubule Bundling during Preprophase Band Formation in Onion Cotyledon Epidermal Cells”, *Mol. Biol. Cell.*, **27**, 1809–1820, (2016), [10.1091/mbc.E15-12-0820](https://doi.org/10.1091/mbc.E15-12-0820)
208. T. Kaji, K. Kakui, N. Miyazaki, K. Murata, AR Palmer, “Mesoscale Morphology at Nanoscale Resolution: Serial Block-face Scanning Electron Microscopy Reveals Fine 3D Detail of a Novel Silk Spinneret System in a Tube-building Tanaid Crustacean”, *Front. Zool.*, **13**, 14, (2016),
[10.1186/s12983-016-0146-0](https://doi.org/10.1186/s12983-016-0146-0)
209. A. Oshima, T. Matsuzawa, K. Murata, K. Tani, Y. Fujiyoshi, “Hexadecameric Structure of an Invertebrate Gap Junction Channel”, *J. Mol. Biol.*, **428**, 1227–36, (2016),
[10.1016/j.jmb.2016.02.01](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2016.02.01)
210. N. Oyama, J. J. Molina, *R. Yamamoto, “Simulations of Model Micro-swimmers with Fully Resolved Hydrodynamics,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, in press
211. S. Mehdi, A. Hamid, A. Ullah, *R. Yamamoto, “Microstructure of Rod like Sedimenting Particles: Direct Numerical Simulations,” *IBCAST*, 622–626 (2017),
[10.1109/IBCAST.2017.7868115](https://doi.org/10.1109/IBCAST.2017.7868115)
212. G. Lericvain, R. Yamamoto, U. Hampel, *T. Taniguchi, “Direct Numerical Simulation of a Single Particle Attachment on a Stationary Immersed Bubble,” *Phys. Fluids*, **28**, 083301, (2016), [10.1063/1.4960627](https://doi.org/10.1063/1.4960627)
213. *T. Sawada, M. Yamagami, S. Akinaga, T. Miyaji, *M. Fujita, “Porous Peptide Complexes by a Folding-and-Assembly Strategy”, *Chem. Asian J.*, in press,
[10.1002/asia.201700458](https://doi.org/10.1002/asia.201700458)
214. S. Wang, T. Sawada, *M. Fujita, “Capsule–bowl Conversion Triggered by a Guest Reaction”, *Chem. Commun.*, **52**, 11653,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- (2016), [10.1039/c6cc06551a](https://doi.org/10.1039/c6cc06551a)
215. *R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, “Theoretical Analyses on a Flipping Mechanism of UV-Induced DNA Damage”, *Biophysics and Physicobiology*, **13**, 311-319, (2016), [10.2142/biophysico.13.0_311](https://doi.org/10.2142/biophysico.13.0_311)
216. W. Tanaka, *M Shoji, F. Tomoike, Y. Ujiie, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, “Molecular Mechanisms of Substrate Specificities of Uridine-Cytidine Kinase”, *Biophysics and Physicobiology*, **13**, 77-84, (2016), [10.2142/biophysico.13.0_77](https://doi.org/10.2142/biophysico.13.0_77)
217. *R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “A Fast Convergent Simulated Annealing Algorithm: Simulated Annealing Outlier FLOODing (SA-OFLOOD) Method”, *Bull. Chem. Soc. Jap.*, **89**, 1361-1367, (2016), [10.1246/bcsj.20160244](https://doi.org/10.1246/bcsj.20160244)
218. R. Yamakado, S. Sato, Y. Shigeta, *H. Maeda, “Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-type Receptor–Anion Complexes”, *J. Org. Chem.*, **81**, 8530–8536, (2016), [10.1021/acs.joc.6b01688](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b01688)
219. *S. Negoro, Y. Kawashima, N. Shibata, T. Kobayashi, T. Baba, Y.-H. Lee, K. Kamiya, Y. Shigeta, K. Nagai, I. Takehara, D.-I. Kato, M. Takeo, Y. Higuchi, “Mutations Affecting the Internal Equilibrium of the 6-aminohexanoate-dimer Hydrolase Reaction”, *FEBS Letter*, **590**, 3133-3143, (2016), [10.1002/1873-3468.12354](https://doi.org/10.1002/1873-3468.12354)
220. W. Naito, N. Yasuda, T. Morimoto, Y. Shigeta, H. Takaya, I. Hisaki, *H. Maeda, “Doubly N-Methylated Porphyrinoids”, *Org. Lett.*, **18**, 3006-3009, (2016), [10.1021/acs.orglett.6b01377](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.6b01377)
221. *R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm with a Modified Inverse Histogram for Reproducing Biologically Relevant Rare-events of Proteins”, *J. Chem. Theory Comput.*, **12**(5), 2436-2445,(2016), [10.1021/acs.jctc.6b00082](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.6b00082)
222. M. Kayanuma, M. Shoji, M. Yoda, M. Odaka, Y. Shigeta, “Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase Subsequent to Cyclic Intermediate Formation: A QM/MM Study”, *J. Phys. Chem. B*, **120**, (13), 3259–3266, (2016), [10.1021/acs.jpcb.5b11363](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.5b11363)
223. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “Sparsity-weighted Outlier FLOODing (OFLOOD) Method: Efficient Rare Event Sampling Method Using Sparsity of Distribution”, *J. Comput. Chem.*, **37**, 724–738,(2016), [10.1002/jcc.24255](https://doi.org/10.1002/jcc.24255)
224. R. Harada, Y. Inagaki, Y. Shigeta, “Protein Folding and Evolution” (**invited review**), *Reference modules in Materials Science and Engineering 2016, Article ID: Protein Folding and Evolution Elsevier*, [10.1016/B978-0-12-803581-8.09800-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.09800-3)
225. Furukawa, K. Yoshikae, T. Mori, H. Mori, V.Y. Morimoto, Y. Sugano, S. Iwaki, T. Minamino, Y. Sugita, Y. Tanaka, T. Tsukazaki, “Tunnel Formation Inferred from the I-Form Structures of the Proton-Driven Protein Secretion Motor SecDF.”, *Cell Rep.*, **9**(5), 895-901, (2017), [10.1016/j.celrep.2017.04.030](https://doi.org/10.1016/j.celrep.2017.04.030)
226. T. Nishikawa, Y. Nagata, M. Sugino, [10.1016/j.celrep.2017.04.030](https://doi.org/10.1016/j.celrep.2017.04.030)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- “Poly(quinoxaline-2,3-diyl) as a Multifunctional Chiral Scaffold for Circularly Polarized Luminescent Materials: Color Tuning, Energy Transfer, and Switching of the CPL Handedness”, *ACS Macro Lett.*, **6**, 431, (2017), [10.1021/acsmacrolett.7b00131](https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.7b00131)
227. Y. Nagata, R. Takeda, and M. Suginome, “High-Pressure Circular Dichroism Spectroscopy up to 400 MPa Using Polycrystalline Yttrium Aluminum Garnet (YAG) as Pressure-Resistant Optical Windows”, *RSC Adv.*, **6**, 109726, (2016), [10.1039/C6RA23736C](https://doi.org/10.1039/C6RA23736C)
228. Y. Nagata, M. Uno, and M. Suginome, “Three-Way-Switchable (Right/Left/OFF) Selective Reflection of Circularly Polarized Light on Solid Thin Films of Helical Polymer Blends”, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **55**, 7126, (2016), [10.1002/anie.201602035](https://doi.org/10.1002/anie.201602035)
229. Y. Nagata, T. Nishikawa, and M. Suginome, “Solvent Effect on the Sergeants-and-Soldiers Effect Leading to Bidirectional Induction of Single-Handed Helical Sense of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s Copolymers in Aromatic Solvents”, *ACS Macro Lett.*, **5**, 519, (2016), [10.1021/acsmacrolett.6b00191](https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.6b00191)
230. B. Wang, M. Nishimura, H. Tang, A. Kawabata, N. F. Mahmoud, Z. Khanlari, D. Hamada, H. Tsuruta, *Y. Mori, “Crystal Structure of Human Herpesvirus 6B Tegument Protein U14”, *PLoS Pathog.*, **12**, e1005594, (2016), [10.1371/journal.ppat.1005594](https://doi.org/10.1371/journal.ppat.1005594)
231. K. Kuroki, K. Mio, A. Takahashi, H. Matsubara, Y. Kasai, S. Manaka, M. Kikkawa, D. Hamada, C. Sato, *K. Maenaka. “Cutting Edge: Class II-like Structural Features and Strong Receptor Binding of the Nonclassical HLA-G2 Isoform Homodimer”, *J Immunol.*, **198**, 3399–3403, (2017), [10.4049/jimmunol.1601296](https://doi.org/10.4049/jimmunol.1601296)
232. V. Lakshmi, Y. Haketa, R. Yamakado, N. Yasuda, *H. Maeda, “Dimension-controlled Assemblies of Anion-responsive π -electronic Systems Bearing Aryl Substituents with Fan-Shaped Geometries”, *Chem. Commun.*, **53**(27), 3834–3837, (2017), [10.1039/c7cc01551h](https://doi.org/10.1039/c7cc01551h)
233. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, *H. Maeda, “Cooperatively Interlocked [2+1]-Type π -System-Anion Complexes”, *Chem. Eur. J.*, **23**(17), 4160–4168, (2017), [10.1002/chem.201605765](https://doi.org/10.1002/chem.201605765)
234. Y. Sasano, N. Yasuda, *H. Maeda, “Negatively Charged π -Electronic Systems by Deprotonation of Hydroxy-Substituted Dipyrrolyldiketone Boron Complexes”, *Chem. Asian J.*, **11**(23), 3423–3429, (2016), [10.1002/asia.201601205](https://doi.org/10.1002/asia.201601205)
235. R. Yamakado, R. Sato, Y. Shigeta, *H. Maeda, “Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-Type Receptor-Anion Complexes”, *J. Org. Chem.*, **81**(18), 8530–8536, (2016), [10.1021/acs.joc.6b01688](https://doi.org/10.1021/acs.joc.6b01688)
236. Y. Haketa, Y. Tamura, N. Yasuda, *H. Maeda, “Dipyrrolypyrimidines as Anion-responsive π -Electronic Systems”, *Org. Biomol. Chem.*, **14**(34), 8035–8038, (2016), [10.1039/c6ob01466f](https://doi.org/10.1039/c6ob01466f)
237. Y. Haketa, D. Katayama, S. Fukunaga, Y. Bando, T. Sakurai, W. Matsuda, S. Seki, *H.



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- [Maeda](#), “Ion-Free and Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive π -Electronic Systems Possessing Directly Linked Alkyl Chains”, *Chem. Asian J.*, **11**(14), 2025–2029, (2016), [10.1002/asia.201600712](https://doi.org/10.1002/asia.201600712)
238. W. Naito, N. Yasuda, T. Morimoto, Y. Shigeta, H. Takaya, I. Hisaki, *H. Maeda, “Doubly N-Methylated Porphyrinoids”, *Org. Lett.*, **18**(12), 3006–3009, (2016), [10.1021/acs.orglett.6b01377](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.6b01377)
239. Y. Haketa, R. Takasago, *H. Maeda, “ β -Perfluoroalkyl-substituted Pyrrole as an Anion-Responsive π -electronic System Through a Single NH Moiety”, *Chem. Commun.*, **52**(46), 7364–7367, (2016), [10.1039/c6cc03619h](https://doi.org/10.1039/c6cc03619h)
240. K. Nakamura, N. Yasuda, *H. Maeda, “Dimension-controlled Assemblies of Modified Bipyrroles Stabilized by Electron-withdrawing Moieties”, *Chem. Commun.*, **52**(44), 7157–7160, (2016), [10.1039/c6cc03423c](https://doi.org/10.1039/c6cc03423c)
241. Y. Haketa, *H. Maeda, “Dimension-controlled Ion-pairing Assemblies Based on π -electronic Charged Species”, *Chem. Commun.*, **53**(20), 2894–2909, (2017), [10.1039/c6cc10255g](https://doi.org/10.1039/c6cc10255g)
242. L. Sheng, *K. Kurihara, “Transformation of Oil Droplets into Giant Vesicles”, *Chem. Commun.*, **52**, 7786–7789, (2016), [10.1039/C6CC01867J](https://doi.org/10.1039/C6CC01867J)
(裏表紙に採択)
243. L. Sheng, *K. Kurihara, “Generation of Catalytic Amphiphiles in a Self-reproducing Giant Vesicle”, *Chem. Lett.*, **45**, 598–600, (2016), [\(2016\), 10.1246/cl.160107](https://doi.org/10.1246/cl.160107)
244. Y. Natsume, H. Wen, T. Zhu, K. Itoh, L. Sheng and *K. Kurihara, “Water-in-oil Emulsion Centrifugation Method to Prepare Giant Vesicles Encapsulating Micrometer-sized Particles”, *J. Vis. Exp.*, (119), e55282, (2017), [10.3791/55282](https://doi.org/10.3791/55282)

図書

- 葛西卓磨, 池谷鉄兵, 木川隆則, “生命分子のNMR計測・解析への応用”, 電子情報通信学会誌, Vol.99, pp439-443, 2016
- *A. Naito, Y. Makino, I. Kawamura, “In-situ Photo Irradiation Solid-state NMR Spectroscopy Applied to Retinal-binding Membrane Protein,” *Mod. Magn. Reson.* Webb ed. Springer (2017) in press, 10.1007/978-3-319-28275-6_51-1
- *A. Naito, Y. Makino, Y. Tasei, I. Kawamura, “Photoirradiation and Microwave Irradiation NMR Spectroscopy,” Experimental Approaches of NMR Spectroscopy – Methodology and Application of Life Science and Material Science-. The NMR Society of Japan ed. Springer (2017) in press.
- *内藤 晶, 固体高分解能NMR(Narrow is beautiful)の構造生命化学研究への展開 NMR (Bulletin of the nuclear magnetic society of japan) 日本核磁気共鳴学会 Vol. 7, pp 8-10, 2016年 11月
- M. Yohda, “Aspartate Racemase: Function, Structure, and Reaction Mechanism”, *D-Amino Acids :Physiology, Metabolism, and*



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

- Application*, T. Yoshimura, T. Nishikawa and H. Homma ed. Springer (Japan), pp 323-337, 2016, [10.1007/978-4-431-56077-7_21](https://doi.org/10.1007/978-4-431-56077-7_21)
- シーエムシー出版(2016)
6. 芳坂貴弘
“非天然アミノ酸の導入”, 人工細胞の創製とその応用 (植田充美監修) 1-5 章, 2017
ISBN 978-4-7813-1233-0
7. 磯部寛之, 佐藤宗太, ”炭素と水素の構造化学 : ありふれた元素・分子からつくる機能性材料”, パリティ (クローズアップ), 2017, vol. 32, No. 3, p. 39-42.
8. 磯部寛之, 佐藤宗太, ”「防虫剤」からリチウムイオン 2 次電池負電極”, パリティ (特集 物理科学, この 1 年), 2017, vol. 32, No. 1, p. 35-36.
9. 佐藤宗太, ”サイボーグ超分子により解き明かされる生命現象～生体分子クラスターを人工巨大分子に移植した一義構造の巨大分子”, 分子研レターズ 73, 2016 年 3 月
10. *R. Iino, S. Sakakihara, Y. Matsumoto, K. Nishino
“Large Scale Femtoliter Droplet Array for Single Cell Efflux Assay of Bacteria”, Methods in Molecular Biology, A. Yamaguchi ed., Springer 2017 in press
11. 神崎秀嗣, 片山勉, 児玉 悟, 新蔵礼子, 矢島孝浩
“「微生物と人類の共存」をゲノムの視点から --- 「日本遺伝学会第 88 会大会」の 1 ワークショップ報告”, 生物の科学 遺伝, Vol. 71, No. 1, pp77-85 (2017)
12. 神谷由紀子, 村山恵司, 横田 啓, 浅沼浩之, “非環状骨格型人工核酸 : aTNA, SNA”, “核酸医薬の創製と応用展開”, 監修 : 和田 猛, p79-86,
13. E. Krayukhina, S. Uchiyama, “Analytical Ultracentrifugation”, *Advanced Methods in Structural Biology*, T. Senda and K. Maenaka ed. Springer (Japan), 165-183, 2016, [10.1007/978-4-431-56030-2](https://doi.org/10.1007/978-4-431-56030-2)
14. M. Noda, K. Fukui, S. Uchiyama
“Mass Spectrometry”, *Advanced Methods in Structural Biology*, T. Senda, K. Maenaka, ed. Springer (Japan), 185-198, 2016, [10.1007/978-4-431-56030-2](https://doi.org/10.1007/978-4-431-56030-2)
15. S. Uchiyama, F. Arisaka, “Important and Essential Theoretical Aspects of AUC”, *Analytical Ultracentrifugation*, S. Uchiyama, F. Arisaka, W. F. Stafford, T. Laue ed. Springer (Japan), 3-14, 2016, [10.1007/978-4-431-55985-6_1](https://doi.org/10.1007/978-4-431-55985-6_1)
16. F. Arisaka, S. Uchiyama, “Experimental Design and Practical Aspect”, *Analytical Ultracentrifugation*, S. Uchiyama, F. Arisaka, W. F. Stafford, T. Laue ed. Springer (Japan), 15-21, 2016, [10.1007/978-4-431-55985-6_2](https://doi.org/10.1007/978-4-431-55985-6_2)
17. S. Saito, S. Uchiyama, “Biopharmaceutical Evaluation of Intermolecular Interactions by AUC-SE”, *Analytical Ultracentrifugation*, S. Uchiyama, F. Arisaka, W. F. Stafford, T. Laue ed. Springer (Japan), 419-440, 2016, [10.1007/978-4-431-55985-6_21](https://doi.org/10.1007/978-4-431-55985-6_21)
18. *Oiki, S.: Dynamics of the Potassium Channel Pore. *Reference Module in Life Sciences*, 2016, Protein Biophysics, Ion Channels and Transporter Proteins, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128096338080924>



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 47

July, 2017

19. 廣島通夫、佐甲靖志
“蛍光1分子可視化技術と超局在化顕微鏡法” 実験医学別冊「初めてでもできる！超解像イメージング」岡田康志編、羊土社（日本）、pp. 213-218, 2016
20. *申 恵媛、中山和久
8章 Arfファミリーによるメンブレントラフィックの調節. Dojin BioScience Series 24 メンブレントラフィック 福田光則・吉森保編 化学同人 pp. 114-129, 2016
21. C. Shingyoji, “Regulation of Dynein-driven Ciliary and Flagellar Movement”, In *Dyneins – Structure, Biology and Disease* (2nd ed.), S. M. King ed., Chapter12. (Academic Press, N.Y.), (2017), *in press*.
22. H. Higuchi and C. Shingyoji, “Measuring the Motile Properties of Single Dynein Molecules,” In *Handbook of Dynein*, K. Hirose ed., Chapter 5 (Pan Stanford Publishing Pte. Ltd.), (2017), *in press*
23. 山本量一、大山倫弘、John J. Molina、Simon K. Schyder
「ソフトマターのモデリング：非平衡系・生物系への挑戦」化学工学（印刷中）
24. John. J. Molina, Ryoichi Yamamoto, Chapter 8 of “Computer Simulation of Polymeric Materials: Applications of the OCTA System”, (Springer, ISBN:978-9811008146), pp 149-167, 2016, [10.1007/978-981-10-0815-3](https://doi.org/10.1007/978-981-10-0815-3)
25. Y. Haketa, H. Maeda, “ π -Electronic Ion-Pairing Assemblies Providing Nanostructured Materials”, *Functional Organic and Hybrid Nanostructured Materials: Fabrication, Properties, and Applications*; Li, Q. Ed.; Wiley-VCH, **2017**, in press.
ISBN: 9783527342549
26. Y. Haketa, R. Yamakado, H. Maeda, “Supramolecular Assemblies of π -Electronic Charged Species”, *Conjugated Objects: Developments, Synthesis, and Application*, Nagai, A.; Takagi, K. Eds., Pan Stanford, **2017**, in press, ISBN: 9789814774031
27. 栗原顕輔, “分子が関わる人工細胞から生命を考える” 季刊 生命誌 **88** (2016)
28. T. Itoh, L. Sheng, *K. Kurihara, “Life Emerged from Oil”, *Atlas of Sci.Accepted*. (2016)

(今回は平成28年4月から平成29年3月までに新たに頂いた情報を掲載しています。)