



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

領域活動を終えるにあたって

加藤晃一

(自然科学研究機構 生命創成探
究センター・A03 計画研究代表
者)



5年間にわたり発行してきたニュースレターも今回で最終号となります。班員ならびに班友の皆様におかれましては、本領域に多大なる貢献をさせていただきましたことにあらためて深く感謝申し上げます。

領域としてのオフィシャルな研究活動はこの3月で終了していますが、私は現在、佐藤・平岡両班長と協力して研究成果の最終とりまとめを行っています。皆様からいただいたデータをもとに、先般、事後評価報告書を提出し、これに基づいて9月10日に事後評価ヒアリングが行われます。年度末にはあらためて研究成果報告書を提出する運びとなっておりますので、その際は皆様あらためてご協力の程、どうぞよろしくお願い申し上げます。

5年前に本領域が発足したのがつい先日のことのようにも感じますが、振り返ればこの間に多くの方々の出会いがあり、新たな共同研究が生み出され、そして、それが異分野融合の成果として結実していく様子を目の当たりにしてまいりました。これにより、私自身も非常に刺激を受け、大いに学ばせていただきました。本領域の成果として発表された論文の成果は1000報を優に超え、領域内共同研究の成果論文は80報にのぼります。それらの中には領域内の3つあるいは4つのグループによる共同研究の成果も見受けられ、領域代表として感に堪えない思いがいたします。

こうした先端研究の成果は、本領域が主催・共催するシンポジウム・ワークショップ・研究会を通じて多様な研究者コミュニティに発信してきました。本領域が擁する先端計測技術および理論的アプローチは *Biochimica et Biophysica Acta* の総説集と *Journal of Computer Chemistry, Japan* の特集号として刊行され、異分野の研究者にも絶好の入門書となっています。さらに、平成27年度より国際活動支援班が設置されたことにより、海外に向けた啓発活動が一気に加速いたしました。若手の海外派遣はもとより、Frontier Bioorganization Forum をはじめとする国際交流活動は領域終了後もとどまるところを知らない活況を呈しています。



出版物や新聞報道の例。領域の枠組みを超えた
応用研究へと展開されています

本領域の活動内容は様々なアウトリーチ活動を通じて社会への浸透をはかってまいりました。本領域の女性若手研究者が中心となって企画・開催していただいた「女子中高生のためのサイエンスカフェ 物理や化学で紐解く生命科学の魅力-女性研究者と考えよう-」では、領域内グループの学生・院生の方々もTAとして参加してくださり好評を博しました。



女子中高生を対象としたサイエンスカ
フェを開催し好評を博しました。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

このように本領域は若手の活躍が際立ったことも大きな特徴になりました。毎年開催された「動的秩序と機能」若手研究会は普段は異なる学会に所属する若手同士が車座で討議する毎年恒例のイベントとして定着しています。さらに、本領域の若手育成活動の集大成ともいえる“Germany-Japan Young Scientist Meeting”をゲッティンゲンの Max Planck Institute で開催し、大きな成功を収めたことは記憶にあたらしいところです。こうした交流活動を経て、それが若手研究者同士の新たな共同研究プロジェクトへと展開していることは実に頼もしい限りです。



ドイツで開催した若手イベントにて

力量ある研究者が集結した本領域は、メンバーのプロモーション実績も高く、領域活動を基盤とした新たな研究プロジェクトの創出に至っています。何人かの班員の方々からは「この領域に入って人生が変わりました」という声さえいただいています。領域代表にとってまさに望外の喜びとするところです。

私自身、この4月に自然科学研究機構に新たに設立された生命創成探究センター(Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS)のセンター長に着任し、新たな異分野研究を推進しています。このセンターは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いに向き合い、異分野融合を通じて生命システムを統合的に理解することを目指すものであり、まさに本新学術領域の精神を受け継いで、その学理の深化に向けた学際的研究の場となりつつあります。

このように新学術領域「動的秩序と機能」は、新たな学理の創出とともに新たな学際的研究者コミュニティを生み出すことに大いに成功したと自信をもって結論することができます。本領域に参加していただいた皆様にもう一度御礼を申し上げたいと思います。

本当にどうもありがとうございました！



「動的秩序と機能」若手研究会を開催し、異分野の若手研究者交流を推進しました



平成 29 年度「動的秩序と機能」全体班会議（沖縄）にて



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

領域活動を終えるにあたり、本新学術領域研究の総括班 研究評価グループメンバー4 名の本領域活動の成果に対する評価コメントを以下に掲載させていただきます。

増原 宏博士 台湾国立交通大学・講座教授



本領域は、それ自身複雑性を秘めた生命分子が動的秩序を形成することにより高次機能を発現する仕組みを、分子レベルから解き明かすことを目指し、加藤晃一領域代表の強いリーダーシップのもと、化学・物理学・生命科学などにわたる広い分野の研究者が横断的な研究を展開してきた。得られた研究成果は膨大な数の論文として発表されており、また積極的に推進された共同研究により多数の共著論文が出版されている。機能発現を示す生体现象の観察・計測・シミュレーション、生体分子・人工超分子の集合組織化のデザイン、人工細胞のモデル系の創出などの結果は、この本領域ならではの特徴ある研究成果である。なかでも生体分子と人工超分子とを組み合わせ、タンパク質の認識機能を有したサイボーグ超分子の創出は特筆に値する。組織的に展開された本領域研究の成果は、初期に設定された目標を大きく超えており、生命科学と有機合成化学が融合し、生命と物質をつなぐ新たな新学術研究領域の誕生が可能になったことを示している。

学会、討論会、国際会議、セミナーにおける研究成果の発表、メンバーの受賞状況も十分である。また本領域が公開シンポジウム、セミナー、国際会議などを積極的に開催し、本新学術領域の目標と得られた結果、知見、手法、方法論などを、該当分野の研究者に次々と発信した結果、「生体システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」の概念は世界で広く認識される場所となった。本領域の活動はきちんと組織化され、新しい工夫が試みられ、その運営は極めて合理的で、多くに研究者の注目を集めた。ホームページ、ニュースレターは充実しており、改定、発刊回数も多く、本領域の情報はプロジェクト内外にいきわたっている。さらなる社会への還元としてアウトリーチ活動が実施され、代表、計画班メンバー、事務局は十分な努力と貢献を行ってきた。

私の知る限り最も活発に研究を展開し、共同研究を推進し、素晴らしい成果を得て、それを最も効果的な広報活動で世に知らせた新学術プロジェクトである。

その結果として若い人材もそだっている。総評として、研究内容、研究マネージ、広報活動のすべての面で、他に例を見ない素晴らしい新学術領域であると考えている。

菅原 正博士 神奈川大学理学部・特任教授



まず、このプロジェクトがスタートした頃に危惧された、生命科学と超分子化学との連携について触れたい。これら2つの領域の融合は、A02 班の佐藤宗太班員の優れた合成力による超構造分子の創出をはじめ、関連研究者の活躍で、急速に進んだ。しかしながら、生命の本質はダイナミクスの階層性にあるので、美しい形の超構造分子の構築に留まることなく、その構造体内部での化学反応、それにとまらぬ秩序構造の形態変化などの時間展開が必要であり、同分野にとって今後さらに挑戦すべき課題が残されているともいえる。その点で、領域代表 (A03 班班長) である加藤晃一領域代表の研究成果の1つであるプロテアソームの研究は、動的秩序形成という領域のスローガンからみて象徴的である。プロテアソームは細胞内タンパク質の分解装置であり、細胞周期の制御などに関わっているとのことだが、単にタンパク質をユニットとした機能性超分子の形成に留まらず、サブユニットを1個変えるだけで崩壊が始まる点が興味深い。また、A03 班の稲垣直之班員の神経軸索延長におけるアクチン細胞骨格とインテグリンをつなぐ Shootin タンパク質についての研究においても、アクチンの脱重合が重要な働きをしている。この間、超分子化学としての自己集合化の研究は大幅に進んだが、環境依存型脱重合に関しては今後の宿題といえよう。

計測面からみると、A01 班寺嶋班員の開発された時間分解拡散係数から、揺らぎと相関のある圧縮率を求め、高分子のダイナミクスを解明する計測法が、合成超分子系にも適応され、優れた成果が得られた。また、A01 班の内橋班員が開発された高速 AFM や、A03 班の内山班員の超分子質量分析は、生体系と人工超分子系をつなぐ上で有用な情報を与えている。このように、本領域は、生命の高次機能がいかんにして発現されるかを、「動的秩序形成」という切り口で解明することで、新しい生命科学の分野を創出したといえる。これは、本領域の研究テーマが、新学術というカテゴリーに適合していたことの証左であり、高く掲げた目標にふさわ



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

しい成果が得られたことを皆さんと共に喜びたい。この成功は、領域リーダーの強力な指導力抜きには語れないが、計画班、公募班に限らず、すべての研究者が自らのテーマに真摯に取り組んだだけでなく、他分野の研究者との共同研究を率先して、かつ楽しげに遂行したことでもたらされたといえる。

桑島 邦博博士 東京大学大学院理学系研究科・名誉教授



前世紀末に勃興したゲノム科学とシステム生物学の進展により、生命体を構成する分子素子をノードとする網羅的な情報ネットワークの解析が進められてきた。本新学術領域研究は、このような現状を踏まえた上で、これらの生命素子が自律的に柔軟かつロバストな高次生命秩序を形成するメカニズムを、化学・物理学・生物学の分野横断的な連携を通して、解き明かすことを目指している。したがって、本領域研究を構成する研究者の研究分野は極めて多岐にわたっている。そのため、当初、私は、領域として目指すべき明確な方向性を示すことが出来るか危惧することもあったが、これは全くの杞憂であった。領域の評価委員として、領域主催の全ての国際シンポジウムと全体班会議に参加したが、いずれも非常に活発な討論がなされ、特に、若手研究者間の研究交流と連携が深められてきた。本領域研究の5年間の研究期間内に、班員により公表された学術論文の総数は、実に1,000を越えており、これらの多くが、異なる研究分野間の、共同研究の成果である。領域代表をはじめとする計画研究メンバーのリーダーシップによった部分もさることながら、多岐にわたる研究分野の研究者が共通のテーマを軸に本領域研究を進めたことが、これらの多くの共同研究の成果に繋がったと考える。領域研究の後半2年間は、ドイツ、台湾、韓国等の海外の研究者との間の国際的な学術研究交流や、領域研究内の若手研究者の海外派遣支援など、領域研究による国際的な研究活動も多くなされた。新学術領域研究の目的とするところは、「研究者相互のインタラクションに基づき、新たな学問領域を切り開いたり、若手研究者の人材育成を計る、大規模グループ研究を支援する」ことにある。これらの点に鑑み、新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」は、「期待以上の成果があった」と評価する。

Christian Griesinger 博士 Max Planck Institute for Biophysical Chemistry · Director, Professor



I would like to congratulate you to the outstanding scientific results that were shown in most interesting lectures and posters. The topics researched by internationally renowned experts is broad and it is impressive to observe how well experts in methods and experts in systems collaborate. Koichi Kato has to be congratulated to managing this group of scientists in a smooth and effective way and the government of Japan has to be applauded for putting together a funding scheme that allows scientists with so vastly different topics as supramolecular synthetic organic chemistry, protein design, phase separation of biomolecules to neuroscience work with experts in techniques such as NMR, X-ray, SAXS, SANS, EM, AFM, mass spectrometry and computer science to go for a common goal, namely the dynamical ordering for creating function. While Germany, my home country, has implemented many funding tools, such a funding tool in which scientists from very different areas and working in different locations in Japan can join does not exist. The closest are “focus area funds” which however in Germany are much more focused thematically than I have observed here. Thus I wish you great success with the final year of the grant.



業績紹介：脱凝集シャペロン ClpB の機能発現を担う構造ダイナミクスの解明

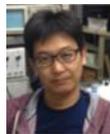
“Dynamic Structural States of ClpB Involved in Its Disaggregation Function”

Takayuki Uchihashi, Yo-hei Watanabe, Yosuke Nakazaki, Takashi Yamasaki, Hiroki Watanabe, Takahiro Maruno, Kentaro Ishii, Susumu Uchiyama, Chihong Song, Kazuyoshi Murata, Ryota Iino, and Toshio Ando

Nat. Commun., 9, 2147, (2018), DOI:10.1038/s41467-018-04587-w

内橋貴之

(名古屋大学・A01 公募研究代表者)



飯野亮太

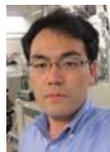
(自然科学研究機構 岡崎統合バイオサイエンスセンター・A02 公募研究代表者)



内山進 (大阪大学 ExCELLS・A03 公募代表者)



村田和義 (生理学研究所・A03 公募代表者)



細菌の ClpB やその出芽酵母のホモログである Hsp104 は、Hsp70 と共同して細胞中で凝集したタンパク質を脱凝集する分子シャペロンである。ClpB/Hsp104 はリング状六量体の多量体を形成していることが生化学的解析や電子顕微鏡観察で知られており、六量体リングの中心孔に凝集タンパク質を取り込み、ATP の加水分解エネルギーによる構造変化で糸通しのように凝集タンパク質を解きほぐしていくと考えられている。一方、最近の電子顕微鏡単粒子解析によって、六量体はリング状ではなくらせん状の構造をしていることが明らかにされたが、脱凝集活性に関連した構造ダイナミクスについて明らかではなかった。そこで高速 AFM を用いて好熱菌由来 ClpB 六量体の ATP 加水分解に共役した構造変化を可視化した。

高速 AFM と電子顕微鏡、ネイティブ質量分析や超遠心分析などの複合解析から、ClpB 六量体は ATP の加水分解によって、対称リング構造と非対称ならせん構造、さらにはリングが切断したオープン構造を経時的に遷移していくことが明らかになり、ClpB リング全体が想定されていたよりもダイナミックな動きをしていることが明らかになった。さらに、構造遷移過程でこれまで知られていなかったねじれらせん構造をと

ることもわかった (図 1 a)。ATP の結合能および加水分解能を阻害した変異体の多量体構造を解析することで、多量体構造の形成と構造ダイナミクスにおける、ATP の結合と加水分解が果たす役割について明らかにした (図 1 b)。

さらに、ClpB の脱凝集活性を抑制あるいは亢進する変異体を観察し、六量体リングの切断とリングの再形成が脱凝集活性に重要であることも明らかにした。

高速 AFM による直接観察によって、脱凝集シャペロン ClpB への ATP の結合と加水分解に対する多量体構造の相関とダイナミクスに関して包括的な描像が得られた (図 1 c)。

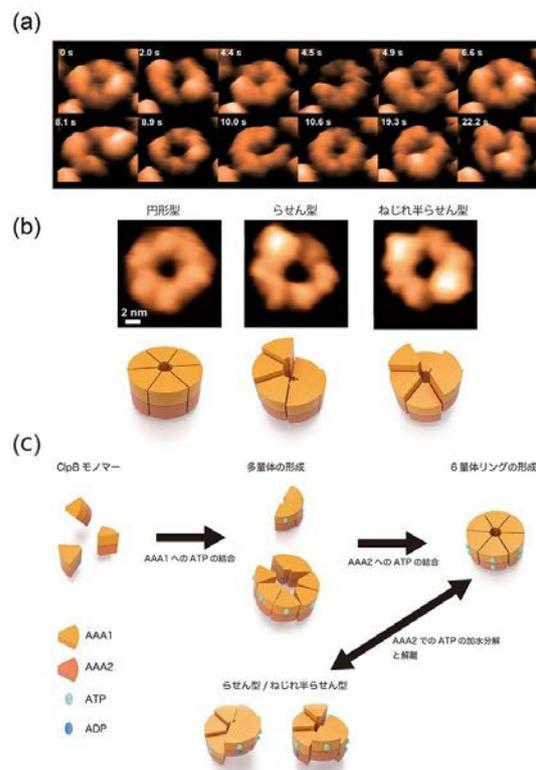


図 1 : (a) ClpB 六量体のダイナミクス。 (b) 典型的な ClpB の六量体構造。 (c) ATP の結合と加水分解に対する ClpB の多量体構造と構造変化の相関図。



業績紹介：タンパク質ナノブロックによる鎖状複合体超分子ナノ構造の構築

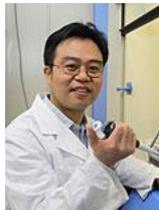
"Self-Assembling Supramolecular Nanostructures Constructed from
de Novo Extender Protein Nanobuilding Blocks"

Naoya Kobayashi, Kouichi Inano, Kenji Sasahara, Takaaki Sato, Keisuke Miyazawa, Takeshi Fukuma,
Michael H Hecht, Chihong Song, Kazuyoshi Murata, and Ryoichi Arai

ACS Synthetic Biology, 7(5), 1381–1394, (2018), DOI: 10.1021/acssynbio.8b00007

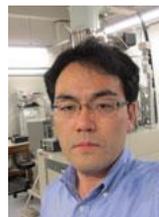
新井亮一

(信州大学繊維学部 / 菌類・微生物ダイナミズム創発研究センター・A02 公募研究代表者)



村田和義

(自然科学研究機構 生理学研究所・A03 公募研究代表者)



ヘテロ複合体(esPN-Block)の構築に成功し、直鎖状構造へのダイナミックな構造変換が示されました(図2)。さらに、直鎖状複合体に金属イオンを添加して基板上で超分子ナノ構造を構築し、原子間力顕微鏡で観察しました(図3右)。これらは、複数種のタンパク質ナノブロックの組み合わせによる動的秩序構造の形成を示した成果です。また当新学術領域における共同研究の機会を活かした成果であり、心より感謝致します。



図1：人工タンパク質 WA20 の特徴的柱状2量体構造

これまでに当研究グループでは、分子間フォールディング2量体を形成する4本ヘリックスバンドル新規人工タンパク質 WA20 の特徴的な柱状2量体構造

(図1)を活かしたタンパク質ナノブロックを設計開発し、対称構造を幾何学的に組み合わせることで、多面体型ナノ構造複合体を創出してきました(Kobayashi *et al.*, *JACS*, 2015, 137, 11285)。本研究では、WA20 をタンデムに結合した新たなタンパク質ナノブロック extender Protein Nanobuilding Block (ePN-Block)を設計開発し、鎖状連結した自己集合ナノ構造複合体を構築することを目指しました(図2)。このePN-Blockを大腸菌で発現、精製し、Native PAGEを行ったところ、ラダー状のバンドパターンが見られ、自己集合により様々な会合体を形成することが示唆されました。これらをサイズ排除クロマトグラフィーにより分画し、多角度光散乱による分子量測定や小角X線散乱による解析、電子顕微鏡による観察(図3左)等を行ったところ、2~5量体の多量体構造の形成が示されました。次に、WA20 (stopper Protein Nanobuilding Block: sPN-Block)と混合して変性及びリフォールディングしたところ、2種類のタンパク質ナノブロックを再構成した

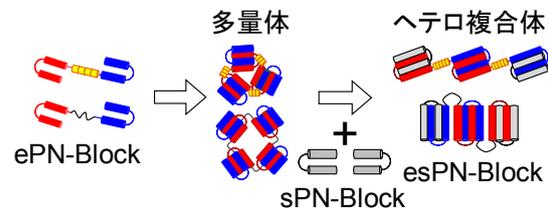


図2：タンパク質ナノブロック (ePN-Block) の多量体形成、およびsPN-Block (WA20) 添加による直鎖状ヘテロ複合体形成の模式図

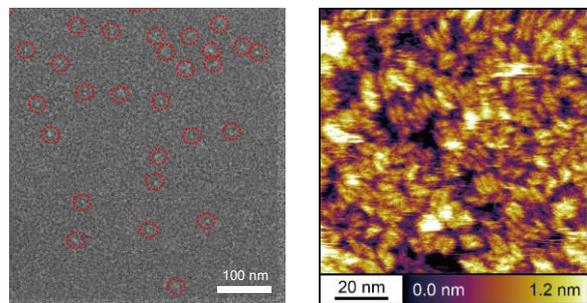


図3：ePN-Block 多量体の電子顕微鏡写真(左)、および金属イオン(Ni²⁺)添加による esPN-Block 複合体超分子ナノ構造の原子間力顕微鏡写真(右)



業績紹介：時計タンパク質 Kai の高速 AFM 可視化より明らかにされた複合体形成と頑強性

“Revealing Circadian Mechanisms of Integration and Resilience by Visualizing Clock Proteins Working in Real Time”

Tetsuya Mori, Shogo Sugiyama, Mark Byrne, Carl Hirschie Johnson,
Takayuki Uchihashi, and Toshio Ando

Nat. Commun., in press

内橋貴之

(名古屋大学・A01 公募研究
代表者)



シアノバクテリアの概日時計システムは Kai 遺伝子群がコードする 3 つの Kai タンパク質(KaiA, KaiB, KaiC)を構成因子とする振動体から構成されている。Kai タンパク質システムのユニークな点は、KaiA、KaiB および Kai C と ATP を試験管内で混合するだけで KaiC のリン酸化状態が概日周期的に長期間に渡って自律的に振動することである。また、3 種類の Kai タンパク質の濃度変動に対しても概日振動は安定に発振する。このような Kai タンパク質による概日振動の頑強性の分子メカニズムは明らかではなかった。

高速原子間力顕微鏡(AFM)を用いて、Kai タンパク質間、特に KaiC と KaiA の複合体形成のダイナミクスを一分子レベルで観察した結果、KaiA と KaiC の結合と解離が秒スケールで起こり、さらに KaiA と KaiC の親和性が KaiC のリン酸化状態に依存して大きく変化する、すなわち、KaiA と KaiC の結合と解離が概日周期と同期して振動する事がわかった(図 1a)。この現象を Phosphoform Dependent Differential Affinity (PDDA) と名付けて、PDDA が概日周期に与える影響を数理モデルで探った。KaiC の 2 ヶ所のリン酸化部位(Ser-431 と Thr-432)のリン酸化及び非リン酸化状態を模倣した 4 種類の変異体(KaiC-AA, AE, DE, DA)に対して、高速 AFM 観察により KaiA の τ_{bound} および $\tau_{unbound}$ を決定し、それらの値と従来から知られていた KaiC の各リン酸化状態のリン酸化および脱リン酸化の反応速度定数を用いて、KaiC のリン酸化リズムをシミュレーションした。その結果、PDDA がない場合、つまり KaiC

と KaiA の親和性が KaiC のリン酸化に依存しない場合には、KaiC 六量体に対して KaiA 二量体の濃度が約 2 倍になると概日周期が長周期化し、2.5 倍程度の濃度比で振動しなくなった。一方、PDDA を計算に取り込むと、濃度比 2 倍以上でも長周期化が抑えられ、濃度比が 3 倍程度まで安定に発振することがわかった(図 1 b)。実際に、概日周期の測定中に KaiA 濃度を急激に上昇させて KaiC のリン酸化リズムの変動を計測したところ、計算結果とよく一致した。この結果から、PDDA は細胞内で安定な概日振動を実現する、Kai タンパク質濃度変動の許容範囲を広げ、概日振動の頑強性を担保していることが明らかになった(図 1 c)。

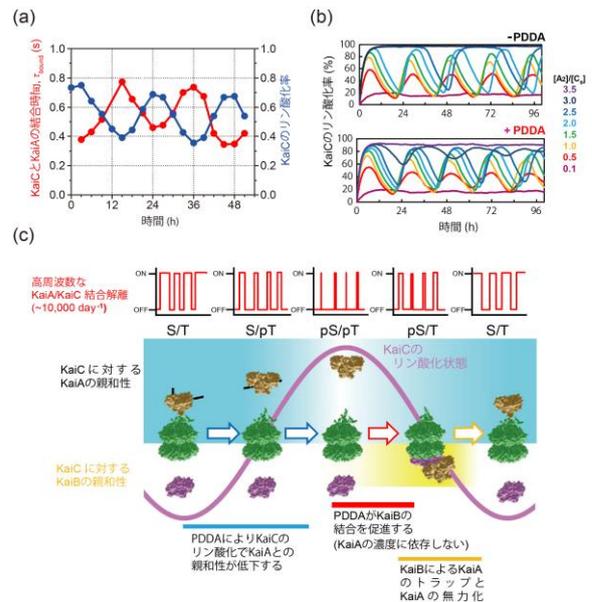


図 1 : (a) KaiC のリン酸化周期と KaiA-KaiC の結合時間。 (b) [KaiA₂]/[KaiC₆]の変動に対する KaiC のリン酸化リズムの変化 (シミュレーション) (c) Kai タンパク質の複合体形成と概日周期の関係。



業績紹介：光照射固体 NMR と DFT 計算による ppR 中間体のレチナール構造の解明

"Retinal Configuration of ppR Intermediates Revealed by Photoirradiation Solid-State NMR and DFT"

Yoshiteru Makino, Izuru Kawamura, Takashi Okitsu, Akimori Wada, Naoki Kamo, Yuki Sudo, Kazushi, Kazuyoshi Ueda, and Akira Naito

Biophys. J., **115**, 72-83, (2018), DOI: [10.1016/j.bpj.2018.05.030](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2018.05.030)

内藤 晶

(横浜国立大学工学研究
院・A01 公募研究代表者)



ファラオニスホボロドプシン(ppR)は膜貫通型光受容膜タンパク質であり、負の光走性の信号を伝達する。すなわち、レチナールが光異性化を起こし、これにより ppR の構造変化が誘起される。その構造変化が信号変換タンパク質(pHtrII)に伝えられ、その信号は最後には鞭毛モーターに伝えられ、菌が光から退避する行動を起こす。この信号伝達系で重要な働きをするのが、図 1 に示すレチナールの光反応サイクルである。

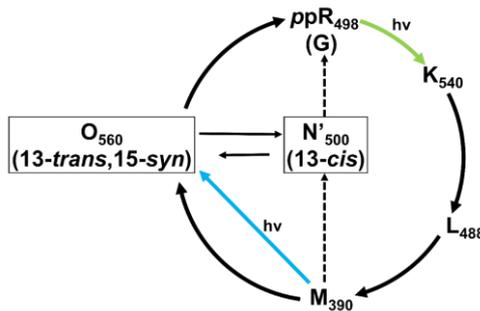


図 1. ppR の光反応サイクル

光反応サイクルで起こる、レチナールの光中間体の詳細を明らかにするため、光照射固体 NMR 装置を開発した。この装置では固体 NMR の試料管の頭部をガラス棒で試料を封入した。そのガラス管の上部から緑色 LED 光を光ファイバーの先から照射した。これによ

り、試料管内部から光受容タンパク質に高い効率で光照射することが可能になった (図 2)。

この光照射固体 NMR を用いて、ppR の光反応サイクル中に生成する光中間体を定常状態で観測し、その配座構造を化学シフト値と DFT 計算から解析した。この結果、図 1 に示すように ppR の暗状態(G)は緑色光照射により M-中間体(13-cis)に変換し、その後、O-中間体(13-trans)に緩和することが明らかになった。さらに、O-中間体は N'-中間体と平衡状態にあることが本研究により明らかになった。

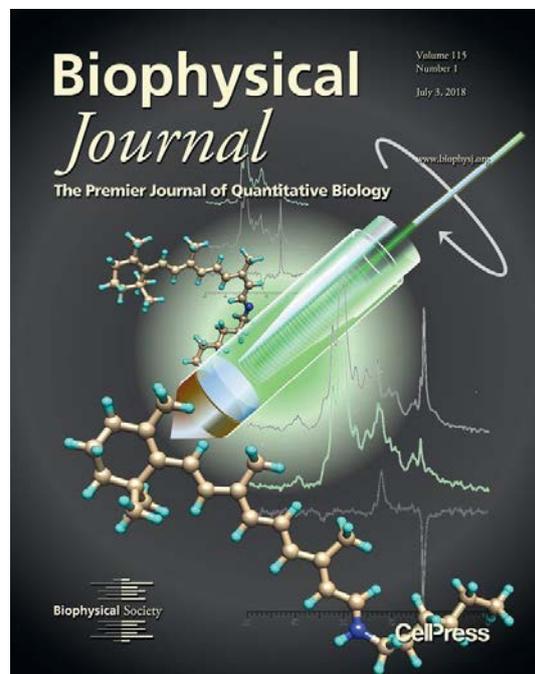


図 2. 光照射固体 NMR 実験の概要

本論文は *Biophysical Journal* 115, 72-83, July 3, 2018 のハイライト論文として表表紙 (図 2) に掲載された。



研究解説:

人工タンパク質および複合体の
デザイン・創出に関する総説

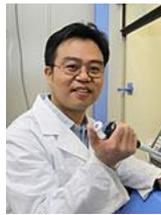
"Hierarchical design of artificial proteins and complexes toward synthetic structural biology"

Ryoichi Arai

Biophysical Reviews, 10, 391–410, (2018),
DOI: 10.1016/10.1007/s12551-017-0376-1

新井 亮一

(信州大学 繊維学部 / 菌類・
微生物ダイナミズム創発研究
センター・A02 公募研究代表
者)



人工タンパク質および人工タンパク質複合体の構造や機能のデザイン・創出は、タンパク質工学や合成生物学、構造生物学分野等で、今後ますます重要な研究課題となりつつあります。そこで、本総説論文では、これらの学際的研究領域として、いわば“構成的構造生物学(Synthetic Structural Biology)”を提唱し、人工タンパク質やタンパク質複合体の階層的構造デザインの観点に着目して、主にコンビナトリアルライブラリー及びタンパク質工学的アプローチと理論及び計算科学的アプローチに分類しながら、関連研究の進展や最近の動向を幅広く紹介しました(図1)。

例えば、コンビナトリアルライブラリー及びタンパク質工学的研究戦略例については、(a)ランダム配列ライブラリーからの分子進化、(b)二次構造要素ライブラリーの構築、(c)Nanohedra 戦略によるタンパク質複合体創製、(d)バイナリーパターン法による人工タンパク質の創出、(e)タンパク質ナノブロックによる人工タンパク質創出、(f)金属配位を利用した分子表面再設計、(g)タンパク質-金属-有機分子フレームワーク超分子創製の研究などを主に紹介しました。さらに、理論的及び計算科学研究戦略例については、(h)αヘリックスコイルドコイルの理論的設計、(i)全自動的配列選択に

よる人工タンパク質設計、(j)計算機デザインによる新規タンパク質フォールドの創出、(k)理想タンパク質構造のデザイン原理、(l)構造モチーフの繰り返しによるタンパク質デザイン、(m)かご型自己集合タンパク質複合体設計、(n)分子間表面のデザインによる高次集合体創製の研究などを主に紹介しました(図1)。

今後、これらの人工タンパク質およびタンパク質複合体を設計創出する多彩な研究戦略は、新たな動的秩序系の構築やタンパク質工学的应用、さらには構成的構造生物学(Synthetic Structural Biology)の発展を加速すると期待されます。

ご興味のある方はぜひ御一読頂ければ幸いです。

(もし本総説論文をダウンロードできない場合には、新井まで遠慮なくご連絡頂ければと思います。

E-mail: rarai@shinshu-u.ac.jp)

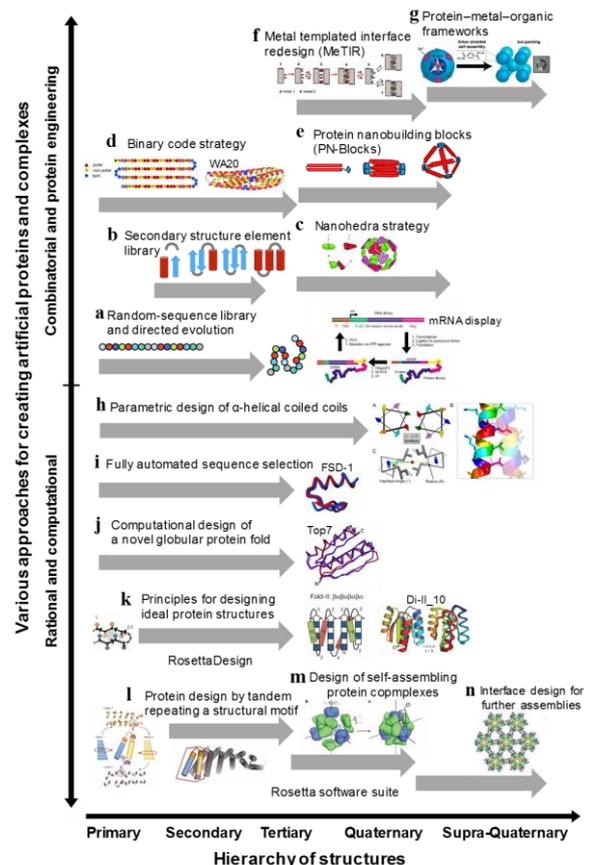


図1 人工タンパク質およびタンパク質複合体創出の階層的構造デザインに関する多彩な研究戦略の概念図。横軸はタンパク質構造の階層性を表し、縦軸は設計創出戦略を表す。上半分(a-g)はコンビナトリアルライブラリー及びタンパク質工学的戦略、下半分(h-n)は理論及び計算科学的戦略。(Springer社の許諾を得て、当該論文より転載)



活動報告
アミロイド線維の形成機構に
関する宇宙実験

加藤晃一

(自然科学研究機構 生命創成探
究センター・A03 計画研究代表
者)



矢木真穂

(自然科学研究機構 生命創成探
究センター・A03 計画研究 連
携研究者)



谷中冴子

(自然科学研究機構 生命創成探
究センター・A03 計画研究 連携
研究者)



前回、領域ニュースレターVol.54にて紹介させていただきましたが、2017年12月～2018年1月に、我々の「アミロイドタンパク質」が宇宙に打ち上げられ、宇宙滞在（宇宙での実験）を経て、地上に無事に帰還しました。この度、宇宙空間にて形成させたアミロイドβ線維の解析に関して速報を発表しましたので、報告させていただきます。

今回行われた第1回目の実験では、条件を変えた少量のアミロイドβタンパク質溶液について、細胞培養装置（Cell Biology Experiment Facility: CBEF）の恒温槽を使ってアミロイド線維化を試みました。

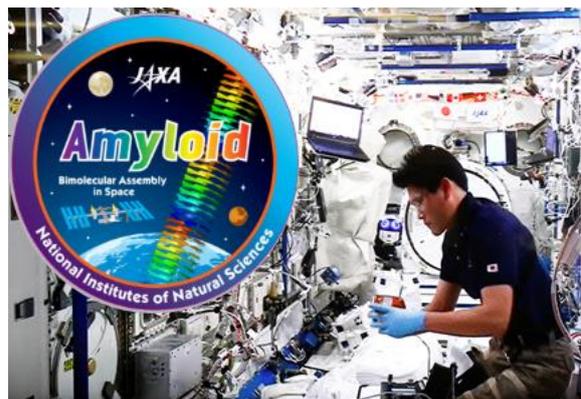
今回は、まず、アミロイド線維形成の有無を調べました。実験試料にはあらかじめ蛍光色素を一緒にいれておきました。この蛍光色素はアミロイドβタンパク質がアミロイド線維を形成する前には発色せず、アミロイド線維を形成した際にだけ結合して発色します。そこで、この蛍光色素の発色の強度を調べることで、どれくらいアミロイド線維が伸長しているのかを知ることができます。金井宇宙飛行士が、6時間後、1日後、3日後、9日後にインキュベーターから取り出して冷凍保存してくださった実験試料を、地上にて解凍し、蛍光強度を測定しました。

その結果、微小重力環境下でもアミロイドβタンパ

ク質の線維化を確認しました。実験を始める前は、微小重力環境下ではアミロイド線維形成がおこらない可能性も考えておりましたが、そうではなく、微小重力環境下でもアミロイドβタンパク質の線維化がおこることが新たにわかりました。

そこで次に、アミロイド線維の伸長速度を調べました。そのために、比較対象として、地上で保管しておいた同じ実験試料を用いて、地上でもアミロイド線維形成を試みました。今回軌道上の実験試料にはあらかじめ小型の温度計を取り付けており、実際に軌道上における温度変化をモニターしていました。そこで、その情報をもとに地上でも同じ温度条件を再現し、実験試料を恒温槽に入れ、経時的に取り出して冷凍保存しました。そして、同様に蛍光計測を行い、軌道上の結果と地上の結果を比較しました。その結果、アミロイドβタンパク質の線維伸長の速度は地上に比べて遅いことがわかりました。アミロイド線維化が遅くなることで、微小重力空間において地上では得られない高品質なアミロイド線維が得られる可能性が高まりました。

第2回実験では、これらの情報をもとに試料の条件・種類を絞り、大容量で調製したアミロイドβタンパク質溶液を微小重力環境においてアミロイド線維を伸長させ、回収した実験試料を電子顕微鏡等で解析してアミロイド線維の構造を調べることを計画しています。



アミロイド宇宙実験のロゴ(左上)と「きぼう」船内で
実験中の金井宇宙飛行士（出典：JAXA）

なお、本プロジェクトに関して、「ドクター金井の宇宙ラボ VOL.1 アミロイド実験 (JAXA)」でも詳しく紹介されております。是非ご覧ください。

http://iss.jaxa.jp/kiboexp/news/180427_amyloid.html



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

活動報告

“Frontier Bioorganization Forum 2018”

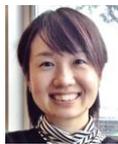
加藤晃一

(生命創成探究センター・A03 計画
研究代表者)



矢木真穂

(生命創成探究センター・A03 計画
研究分担者)



2018年7月8日～11日、自然科学研究機構生命創成探究センター（岡崎）にて、“Frontier Bioorganization Forum 2018”を開催しましたので報告させていただきます。本イベントは、本新学術領域の共催のもと、生命創成探究センターおよび分子科学研究所の主催で行われました。

前回の“Frontier Bioorganization Forum 2017”（領域ニューズレター第46号にて報告）は、日本と台湾の2か国がメインのフォーラムでしたが、今回は台湾中央研究院のMing-Daw Tsai先生、Rita P.Y. Chen先生、および韓国のWeontae Lee先生（Yonsei University）とJooyoung Lee先生（KIAS）にご協力いただき、日本・台湾・韓国の3か国間のイベントへと発展することができました。また、これまで韓国の生体分子科学関連の研究者と分子研の研究者が中心となり毎年“Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation”を開催してきたのですが、今年でちょうど10回目という節目にあたり、Frontier Bioorganization

Forum 2018 と合同開催することができました。

本フォーラムは、生体分子科学を中心に、実験と理論の相互理解・協奏的な融合研究発展を目指すとともに、物理・化学・生物の垣根を超えて分野横断的に研究理解を深めること、研究交流を深めて国際共同研究を発展させることを目的として開催しました。さらに、今年4月より始動した生命創成探究センターの研究活動について披露すること、本新学術領域の活動を広く国際的に啓発することも目的としました。招待講演35演題を中心に、4日間に渡って、非常にハイレベルな講演と活発な意見交換がなされました。本領域からは、加藤に加え、秋山修志先生、佐藤啓文先生、内橋貴之先生、稲垣直之先生、内山進先生、奥村久士先生にご講演をいただきました。

会期中、講演の合間の休憩時間はもちろんのこと、懇親会や夕食時、2次会、3次会、、、と研究ディスカッションは尽きず、随所において共同研究の話に花を咲かせている光景が見受けられました。

近年、アジア諸国との交流・連携は、個別の研究活動だけでなく、大学院教育や生命科学の発展そのものにおいてもますます重要性が高まっており、さまざまな機会を通じて意識共有を図り、研究ネットワークを広く構築していくことは非常に意義が大きいと考えます。本フォーラムを開催することにより、新たな人的ネットワークを構築するとともに、有機的な国際研究交流を強化し、ライフサイエンスの今後の発展に向けての意見交換、情報共有、異分野融合の芽を見出すことができたものと思います。

次回は韓国にて Frontier Bioorganization Forum 2019 を開催予定です。本新学術領域の精神を引き継ぎつつさらに発展的に展開されることを期待します。



集合写真



平岡グループの Yiyang Zhan さんが日本化学会第 98 春季年会で学生優秀講演賞と
第 16 回ホスト・ゲスト超分子化学シンポジウムでポスター賞を受賞

平岡秀一

(東京大学 総合文化研究科・
A02計画研究代表者)



この度、我々の研究室の博士課程二年生の Yiyang Zhan 君が日本化学会第 98 春季年会で学生優秀講演賞と第 16 回ホスト・ゲスト超分子化学シンポジウムでポスター賞を受賞しました。Yiyang Zhan 君は以前のニュースレターにおいて研究業績の欄で紹介してきたナノキューブという人工系の自己集合体に関する研究に携わっており、このプロジェクトで中心的な役割を果たしている。ナノキューブは歯車状両親媒性分子 (Gear-Shaped Amphiphile: GSA) が水中で主に van der Waals 力と疎水効果により箱型の六量体へ自己集合した分子である。以前に、ナノキューブの熱安定性が分子の噛み合い、すなわち van der Waals 力に大きく依存することを報告してきた。今回の受賞の対象となった成果は、ナノキューブの速度論的安定性に関する研究で、A03 班の内山班員 (大阪大学) と前田班友 (立命館大学) との 3 グループによる共同研究である。研究の結果、ナノキューブの速度論的安定性は熱安定性と相関があることが明らかになった。また、濃度効果からナノキューブが構成要素を互いに交換する機構が明らかになった。さらに、異なるナノキューブを混合すると、構成要素間の交換により二種類の構成要素からなるヘテロなナノキューブ変換が観測され、ゲスト分子が及ぼす効果も明らかとなった。これまで、自己集合体に関する研究は、熱力学的な研究が主に行われており、今回得られたような速度論的特性に関しては、ほとんど研究が行われてこなかった。これらの成果は、今後、複数種の構成要素からなるナノキューブなど低対称化された自己集合体を形成するための基礎知見となると考えられる。

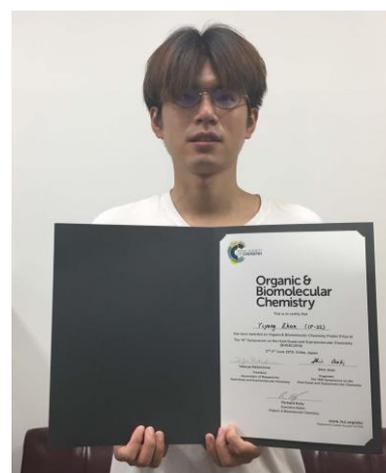
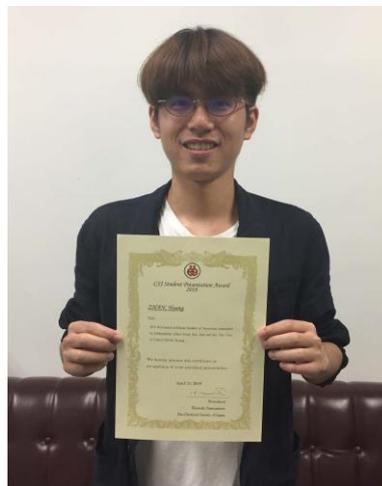


図 1. Yiyang Zhan 君と日本化学会第 98 春季年会の学生優秀講演賞の賞状(上)、第 16 回ホスト・ゲスト超分子化学シンポジウムでのポスター賞の賞状(中)と副賞(下)



加藤グループの齋藤泰輝さんが ExCELLS Young Scientists Forum 2018 で
Poster Presentation Award を受賞

加藤晃一

(自然科学研究機構 生命創成探
究センター・A03 計画研究代表者)



加藤グループの齋藤泰輝君（名古屋市立大学・大学院薬学研究科・修士1年）が、2018年7月10日に生命創成探究センター（岡崎）で行われた ExCELLS Young Scientists Forum 2018 にて Poster Presentation Award を受賞しましたので報告いたします。

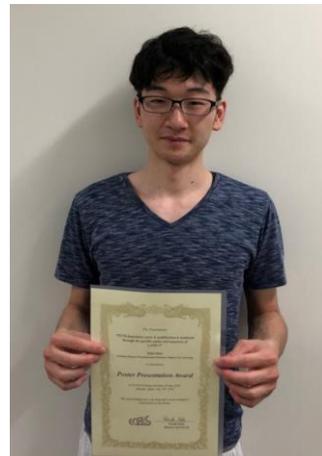
ExCELLS Young Scientists Forum 2018 は、Frontier Bioorganization Forum 2018（2018年7月8日～11日）の一部として共同開催されました。ExCELLS 所属の若手研究者や学生が中心となって運営委員を務め、企画・運営を行いました。今回の発表はすべて助教以下の若手研究者による発表に限定し、当日は3件の口頭発表に加え、23件のポスター発表がなされました。台湾から5件、韓国から5件のポスター発表がありました。ポスター賞の審査は、韓国・台湾からの招待講演者および ExCELLS 所属以外の招待講演者の先生方をお願いし、ポスドク・学生に限定して審査を行いました。発表者の皆さんは英語でプレゼンテーションを行い、1時間半という限られた時間ではありましたが、どれもレベルの高い発表内容で、終始白熱したディスカッションが展開されていました。

齋藤君の発表演題は、“FUT9-dependent Lewis X modification is mediated through the specific amino acid

sequence of LAMP-1”で、特定アミノ酸配列による糖鎖修飾制御について発表しました。彼の益々の活躍に期待します。

<齋藤君のコメント>

この度、ポスター賞を頂きまして、大変光栄に存じます。ポスターセッションでは、多くの先生方が私の発表に立ち寄ってくださいました。特に、異分野の方と議論することができたおかげで、いかに研究内容を分かりやすく伝達するか、また、聞き手の理解度を意識しながら、発表を行うことができました。もちろん反省点もありますが、とても良い経験になりました。この受賞を機に、さらに研究に力を注ぎ、魅力的な学会発表ができるように邁進してまいります。常々、親身になってご指導くださる研究室の方々にこの場を借りてお礼申し上げます。



賞状と齋藤君



ExCELLS Young Scientists Forum 2018 集合写真



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

新井班員の研究成果が掲載される

A02 公募研究代表者の新井亮一班員の研究成果が2018年5月19日付の信濃毎日新聞に掲載されました。また、2018年5月23日付の朝日新聞（長野版）にも研究成果が掲載されました。



加藤領域代表がセンター長を務める生命創成探究センター (ExCELLS) が誕生

加藤センター長のインタビューが 2018 年 4 月 16 日付の中日新聞に掲載されました。ExCELLS の開所式の様子が 2018 年 5 月 29 日付の中日新聞、2018 年 5 月 30 日付の読売新聞に掲載されました。



ExCELLS のロゴ

岡崎に新設 生命創成探究センター長・加藤さんに聞く

分野横断「生とは何」迫る

最先端の科学を研究する自然科学研究機構（東京都港区）が今月、生命の本質を探る「生命創成探究センター」を岡崎市に新設した。生命科学、情報科学、深海研究などの多分野の研究者が連携し「生きているとは何か」との根源的な問いに迫る。加藤晃一センター長（巴）に研究の方向性を聞いた。

（森田真奈子）

センター設立の目的は、生命科学は、生命体を分子レベルにするべく、細かく分解して機能を調べてきた。その代わり、生命体と物質の境界を調ってきた。生命体とは何か、生命体と物質の境界は、何なのか、分らないことが多い。放射線や零下二七〇度の低温など過酷な環境でも生き延びるクマノエの事例では、水がない環境でも死なず、乾眠状態をとり、水分をとる仕組みを理解するためには、細胞間の関連性と通常の活動を回復させることが重要。最近では、バクテリアの科学ヒックデータを

「多分野の研究者と連携して生命とは何かを探りたい」と話す加藤センター長＝岡崎市の自然科学研究機構・分子科学研究所で

解析する。それらに基づき、人工細胞など生命の機能を持つものを、コンピュータ上で設計した上で実際につくられるかどうかが分からないが、つくるプロセスを通して生命の仕組みを読み解きたい。どのような研究者が参加するか、自然科学研究機構のうち、岡崎市の基礎生物学、生理学、分子科学の三研究所から十八の研究室が参加。過酷な環境で生きる極限環境生命や情報科学の専門家なども連携する。

自然科学研究機構 大学共同利用機関法人で、5カ所の研究機関と生命創成探究センターを含めた3センターで構成。研究機関は岡崎市の基礎生物学、生理学、分子科学の3研究所と、国立天文台（東京都三鷹市）、核融合科学研究所（岐阜県土岐市）。機構に所属する研究者のほか、全国の大学などの研究者も施設を利用できる。

(中日新聞 4月16日)

「生命とは」連携し研究
自然科学機構 岡崎でセンター開所式

テープカットをする加藤センター長（右）＝岡崎市明大寺町の自然科学研究機構で

多分野が連携して生命の成り立ちを研究する自然科学研究機構・生命創成探究センターの開所式が二十八日、岡崎市明大寺町の同機構構山手地区であり、センターの研究者ら百人が参加した。

センターは自然科学研究機構（東京都港区）の直属組織として岡崎市に四月に設立。これまで市内にあった機構の基礎生物学、生理学、分子科学の三研究所の施設をそのまま利用する。式では加藤晃一センター長が「分野を横断して協力

しながら、生命とは何かを研究する。国内外の研究者に対しても開かれた共同利用の拠点となることを目指す」とあいさつ。小森彰夫機構長らも参加し、テープカットをした。

センターには三研究所から十八の研究員の教員や学生らが参加。そのほか、深海研究や情報科学など国内外の研究者とも連携する。

（森田真奈子）

アビタ 安城製菓元

生命創成探究センター 開所式 2018年5月26日

(中日新聞 5月29日)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

最近の動き

雑誌論文

1. Y. Matsumura, S. Iuchi, *H. Sato, “A Model Electronic Hamiltonian for the Self-assembly of an Octahedron-shaped Coordination Capsule”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 1164-1172, (2018), [10.1039/c7cp06094g](https://doi.org/10.1039/c7cp06094g)
2. H. Arefi, *T. Yamamoto, “Communication: Self-assembly of a Model Supramolecular Polymer Studied by Replica Exchange with Solute Tempering”, *J. Chem. Phys.*, **147**, 211102, (2017), [10.1063/1.5008275](https://doi.org/10.1063/1.5008275)
3. Y. Matsumura, S. Iuchi, S. Hiraoka, *H. Sato, “Chiral Effects on the Final Step of an Octahedron-shaped Coordination Capsule Self-assembly”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 7383-7386, (2018), [10.1039/C7CP08237A](https://doi.org/10.1039/C7CP08237A)
4. H. Arefi, *T. Yamamoto, “Self-assembly of a Model Supramolecular Polymer Studied by Replica Exchange with Solute Tempering”, *J. Chem. Phys.*, (Commun), **147**, 211102, (2017), [10.1063/1.5008275](https://doi.org/10.1063/1.5008275)
5. Y. Nakasone, M. Ohshima, K. Okajima, S. Tokutomi, *M. Terazima, “Photoreaction Dynamics of LOV1 and LOV2 of Phototropin from *Chlamydomonas Reinhardtii*”, *J. Phys. Chem. B*, **122**, 1801-1815, (2018), [10.1021/acs.jpcc.7b10266](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10266)
6. A. Takakado, Y. Nakasone, *M. Terazima, “Sequential DNA Binding and Dimerization Processes of the Photosensory Protein EL222”, *Biochemistry*, **57**, 1603-1610, (2018), [10.1021/acs.biochem.7b01206](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.7b01206)
7. K. Shibata, Y. Nakasone, *M. Terazima, “Photoreaction of BlrP1: a Role of Nonlinear Photo-intensity Sensor”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 8133-8142, (2018), [10.1039/c7cp08436f](https://doi.org/10.1039/c7cp08436f)
8. *K. Iwata; *M. Terazima; *H. Masuhara, “Novel Physical Chemistry Approaches in Biophysical Researches with Advanced Application of Lasers: Detection and Manipulation”, *Biochim. Biophys. Acta. (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 335-357, (2018), [10.1016/j.bbagen.2017.11.003](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.11.003)
9. 上久保裕生, 「連続滴定 X 線溶液散乱測定を志向した μ 流路型自動サンプリングシステムの開発」、*Journal of Computer Chemistry Japan*, **17** 卷(2018)1 号, 57-64, (2018), [org/10.2477/jccj.2018-0008](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0008)
10. M. Yamaguchi, E. Ohta, T. Muto, T. Watanabe, T. Hohsaka, Y. Yamazaki, H. Kamikubo, *M. Kataoka, “Statistical Description of the Denatured Structure of a Single Protein, Staphylococcal Nuclease, by FRET Analysis”, *Biophys Rev.*, **10**(2), 145-152, (2018), [10.1007/s12551-017-0334-y](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0334-y)
11. A. Mukaiyama, Y. Furuike, J. Abe, E. Yamashita, T. Kondo, S. Akiyama, “Conformational Rearrangements of the C1 Ring in KaiC Measure the Timing of Assembly with KaiB”, *Sci. Rep.*, **8**, 8803, (2018), [10.1038/s41598-018-27131-8](https://doi.org/10.1038/s41598-018-27131-8)
12. *S. Akiyama, A. Mukaiyama, J. Abe, Y. Furuike, “Cyanobacterial Circadian Clock System: How and Why can it be so Slow and Stable?”, *Biological Clocks, proceedings of the Sapporo Symposium on Biological Rhythms*, 73-77, (2017)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

13. *Y. Nakamura, A. Yoshimori, R. Akiyama, T. Yamaguchi “Stick Boundary Condition at Large Hard Sphere Arising from Effective Attraction in Binary Hard-sphere Mixtures”, *J. Chem. Phys.*, **148**, 124502 (2018), [10.1063/1.5025202](https://doi.org/10.1063/1.5025202)
14. *K. Tokunaga, *R. Akiyama “Basic Cell Size Dependence of Displacement for a Solvation Motor in a Lennard-Jones Solvent”, *J. Comp. Chem. Jpn.*, **17**, 80–84, (2018), [10.2477/jccj.2018-0004](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0004)
15. T. Ikeya, *Y. Ito, “Protein NMR Structure Refinement Based on Bayesian Inference for Dynamical Ordering of Biomacromolecules”, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **7** (1), 65-75, (2018), [10.2477/jccj.2018-0009](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0009)
16. *K. Iwata, *M. Terazima, *H. Masuhara, “Novel Physical Chemistry Approaches in Biophysical Researches with Advanced Application of Lasers: Detection and Manipulation”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 335-357, [10.1016/j.bbagen.2017.11.003](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.11.003)
17. *T. Takaya, M. Anan, *K. Iwata, “Vibrational Relaxation Dynamics of β -carotene and its Derivatives with Substituents on Terminal Rings in Electronically Excited States as Studied by Femtosecond Time-resolved Stimulated Raman Spectroscopy in near-IR”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3320-3327, (2018), [10.1039/C7CP06343A](https://doi.org/10.1039/C7CP06343A)
18. F. Lu, N. Kitamura, T. Takaya, K. Iwata, *T. Nakanishi, Y. Kurashige, “Experimental and Theoretical Investigation of Fluorescence Solvatochromism of Dialkoxyphenyl-pyrene Molecules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3258-3264, (2018), [10.1039/C7CP06811E](https://doi.org/10.1039/C7CP06811E)
19. *R. Ohtani, T. Tokita, T. Takaya, *K. Iwata, M. Kinoshita, N. Matsumori, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “Morphology Controls of Hybrid Liposomes Using Metal Complex Lipids and Viscosities for Photo-chemical Reaction in Hydrophobic Fields”, *Chem. Comm.*, **53**, 13249-13252, (2017), [10.1039/C7CC07944C](https://doi.org/10.1039/C7CC07944C)
20. B. Narayan, K. Nagura, T. Takaya, K. Iwata, A. Shinohara, H. Shinmori, H. Wang, Q. Li, X. Sun, H. Li, S. Ishihara, *T. Nakanishi, “Regioisomeric Effect on Photo-physical Properties of Alkylated-naphthalene Liquids”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 2970-2975, (2018), [10.1039/C7CP05584F](https://doi.org/10.1039/C7CP05584F)
(2017 PCCP HOT Article, Inside Front Cover)
21. T. Mori, S. Sugiyama, M. Byne, *C. H., Johnson, *T. Uchihashi, *T. Ando, “Revealing circadian mechanisms of integration and resilience by visualizing clock proteins working in real time”, *Nat. Commun.*, (accepted)
22. T. Uchihashi, *Y. Watanabe, Y. Nakazaki, T. Yamasaki, H. Watanabe, T. Maruno, K. Ishii, S. Uchiyama, C. Song, K. Murata, *R. Iino, *T. Ando, “Dynamic Structural States of ClpB Involved in its Disaggregation Function”, *Nat. Commun.*, **9**, 2147, (2018), [10.1038/s41467-018-04587-w](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04587-w)
23. M. Shibata, K. Inoue, K. Ikeda, M. Konno, M. Singh, C. Kataoka, R. Abe-Yoshizumi, *H. Kandorix, *T. Uchihashi, “Oligomeric States of Microbial Rhodopsins Determined by High-speed Atomic Force Microscopy and



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Circular Dichroic Spectroscopy”, *Sci. Rep.*, **8**, 8262, (2018), [10.1038/s41598-018-26606-y](https://doi.org/10.1038/s41598-018-26606-y)
24. T. Umakoshi, H. Udaka, T. Uchihashi, T. Ando, M. Suzuki, *T. Fukuda, “Quantum-dot Antibody Conjugation Visualized at the Single-molecule Scale with High-speed Atomic Force Microscopy”, *Colloids Surf., B.*, **167**, 267-274, (2018), [10.1016/j.colsurfb.2018.04.015](https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2018.04.015)
25. *内橋貴之
“高速原子間力顕微鏡によるタンパク質の動態可視化と画像解析”, *J. Comp. Chem., Jpn.*, **17**, 20-30, (2018), [10.2477/jccj.2018-0001](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0001)
26. 内橋貴之, 「高速原子間力顕微鏡によるタンパク質の動画撮影」, *パリティ* 2018-01, 71-73 (2018)
27. M. Hosoyamada, *N. Yanai, K. Okumura, T. Uchihashi, N. Kimizuka, “Translating MOF Chemistry into Supramolecular Chemistry: Soluble Coordination Nanofibers Showing Efficient Photon Upconversion”, *ChemComm.*, **54**, 6828-6831, (2018), [10.1039/C8CC01594E](https://doi.org/10.1039/C8CC01594E)
28. N. Terahara, Y. Inoue, N. Kodera, Y. V. Morimoto, T. Uchihashi, K. Imada, T. Ando, K. Namba, *T. Minamino, “Insight into Structural Remodeling of the FlhA Ring Responsible for Bacterial Flagellar type III Protein Export”, *Sci. Adv.*, **4**, 7054, (2018), [10.1126/sciadv.aao7054](https://doi.org/10.1126/sciadv.aao7054)
29. A. Oda, S. Nagao, M. Yamanaka, H. Watanabe, T. Uchihashi, I. Ueda, N. Shibata, Y. Higuchi, *S. Hirota, “Construction of a Triangle-Shaped Trimer and a Tetrahedral Structure Using an α -Helix-Inserted Circular Permutant of Cytochrome *c*₅₅₅”, *Chem. Asian. J.*, **13**, 964-967, (2018), [10.1002/asia.201800252](https://doi.org/10.1002/asia.201800252)
(フロントカバーに採用)
30. H. Tsukamoto, M. Higashi, H. Motoki, H. Watanabe, C. Ganser, K. Nakajo, Y. Kubo, T. Uchihashi, *Y. Furutani, “Structural Properties Determining Low K⁺ Affinity of the Selectivity Filter in the TWIK1 K⁺ Channel”, *J. Biol. Chem.*, **293**, 6969-6984, (2018), [10.1074/jbc.RA118.001817](https://doi.org/10.1074/jbc.RA118.001817)
31. T. Maruno, H. Watanabe, T. Uchihashi, S. Adachi, K. Arai, T. Sawaguchi, *S. Uchiyama, “Sweeping of Adsorbed Therapeutic Proteins on Prefillable Syringe Enhances Subvisible Particles Generation”, *J. Pharm. Sci.*, **107**, 1521-1529 (2018), [10.1016/j.xphs.2018.01.021](https://doi.org/10.1016/j.xphs.2018.01.021)
32. T. Haruyama, T. Uchihashi, Y. Yamada, N. Kodera, T. Ando, *H. Konno, “Negatively Charged Lipids are Essential for Functional and Structural Switch of Human 2-Cys Peroxiredoxin II”, *J. Mol. Biol.*, **430**, 602-610, (2018), [10.1016/j.jmb.2017.12.020](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2017.12.020)
33. T. Takeda, T. Kozai, H. Yang, D. Ishikuro, K. Seyama, Y. Kumagai, T. Abe, H. Yamada, T. Uchihashi, *T. Ando, *K. Takei, “Dynamic Clustering of Dynamin-amphiphysin Helices Regulates Membrane Constriction and Fission Coupled with GTP Hydrolysis”, *e-Life*, **7**, e3024, (2018), [10.7554/eLife.30246](https://doi.org/10.7554/eLife.30246)
34. M. Yagi-Utsumi, A. Sikdar, T. Kozai, R. Inoue, M. Sugiyama, T. Uchihashi, T. Satoh, *K. Kato, “Conversion of Functionally Undefined Homopentameric Protein PbaA into a Proteasome Activator by Mutational Modification of its C-terminal Segment Conformation”, *Protein Eng. Des. Sel.*, **31**, 29-36, (2018), [10.1093/protein/gzx066](https://doi.org/10.1093/protein/gzx066)
35. A. Nakamura, T. Tasaki, Y. Okuni, C. Song, K. Murata, T. Kozai, M. Hara, H. Sugimoto, K. Suzuki, T. Watanabe, T. Uchihashi, H. Noji, *R. Iino, “Rate Constants, Processivity, and Productive Binding Ratio of Chitinase A Revealed by Single-molecule Analysis”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3010-3018, (2018), [10.1039/c7cp04606e](https://doi.org/10.1039/c7cp04606e)
36. *T. Uchihashi, S. Scheuring, “Review: Applications of High-speed Atomic Force Microscopy to Real-time Visualization of Dynamic Biomolecular Processes”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 229-



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- 2410, (2017), [10.1016/j.bbagen.2017.07.010](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.07.010)
37. 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*, **128**, 392–396, (2017), [10.1016/j.polymer.2017.01.024](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.01.024)
38. J. Sawada, D. Aoki, M. Kuzume, K. Nakazono, S. Uchida, H. Otsuka, *T. Takata, “Vinyllic Rotaxane Cross-linker for Toughened Network Polymer via Radical Polymerization of Vinyl Monomers”, *Polym. Chem.*, **8**, 1878-1881, (2017), [10.1039/C7PY00193B](https://doi.org/10.1039/C7PY00193B)
39. *T. Takata, D. Aoki, “Topology-Transformable Polymer: Linear–Branched Polymer Structure Change Utilizing Mechanical Linking of Polymer Chains”, *Polymer Journal*, **50**, 127–147, (2018), [10.1038/pj.2017.60](https://doi.org/10.1038/pj.2017.60)
40. H. Sato, D. Aoki, *T. Takata, “Which One is Bulkier: The 3,5-Dimethylphenyl or the 2,6-Dimethylphenyl Group? Development of Size-Complementary Molecular and Macromolecular [2]Rotaxanes”, *Chem. Asian J.*, **13**, 785–789, (2018), [10.1002/asia.201800170](https://doi.org/10.1002/asia.201800170)
41. *R. Harada, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Hiraoka, *Y. Shigeta, “Programed Dynamical Ordering in the Self-organization Processes of a Nanocube: A Molecular Dynamics Study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 9115-9122, (2018), [10.1039/C8CP00284C](https://doi.org/10.1039/C8CP00284C)
42. N. Tanaka, Y.-Y. Zhan, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Koide, T. Mashiko, U. Nagashima, M. Tachikawa, *S. Hiraoka, “Semi-quantitative Evaluation of Molecular Meshing by Surface Analysis with Varying Probe Radii”, *Chem. Commun.*, **54**, 3335-3338, (2018), (selected as Back Cover), [10.1039/c8cc00695d](https://doi.org/10.1039/c8cc00695d)
43. Y.-Y. Zhan, K. Ogata, T. Kojima, T. Koide, K. Ishii, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Uchiyama, and *S. Hiraoka, “Hyperthermostable Cube-shaped Assembly in Water”, *Communications Chemistry*, **1**, 14, (2018), [10.1038/s42004-018-0014-2](https://doi.org/10.1038/s42004-018-0014-2)
44. *H. Kato, S. Yoshimoto, A. Ueda, S. Yamamoto, Y. Kanematsu, M. Tachikawa, H. Mori, J. Yoshinobu, I. Matsuda, “Strong Hydrogen-Bonds at the interface between Proton-Donating and Accepting Self-Assembled Monolayers on Au(111)”, *Langmuir*, **34**, 2189-2197, (2018), [10.1021/acs.langmuir.7b03451](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b03451)
45. *T. Udagawa, *M. Tachikawa, “Reaction Mechanism of Hydrogen-tritium Exchange Reactions between Several Organic and HTO Molecules: A role of the second HTO”, *RSC Advances*, **8**, 3878-3888, (2018), [10.1039/C7RA13110K](https://doi.org/10.1039/C7RA13110K)
46. T. Kawatsu, *M. Tachikawa, “The Quantum Fluctuations of the Fullerene Cage Modulate the Internal Magnetic Environment”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 1673-1684, (2018), [10.1039/C7CP06401B](https://doi.org/10.1039/C7CP06401B)
47. K. Suzuki, *T. Takayanagi, Y. Kita, M. Tachikawa, T. Oyamada, “Quantum Dynamics Calculations for $e^+ + \text{LiH} \rightarrow \text{Li}^+ + [\text{H}^-; e^+]$ Dissociative Positron Attachment



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Using a Pseudopotential Model”, *Comput. Theo. Chem.*, **1123**, 135-141, (2018), [10.1016/j.comptc.2017.11.023](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2017.11.023)
48. S. Kai, V. Marti-Centelles, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, U. Nagashima, M. Tachikawa, P. J. Lusby, *S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-Assembly Process of a Pd₂L₄ Cage Consisting of Rigid Ditopic Ligands”, *Chem. Eur. J.*, **24**, 663-671, (2018), [10.1002/chem.201704285](https://doi.org/10.1002/chem.201704285)
49. S. Kai, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, M. Tachikawa, *S. Hiraoka, “The Effect of Solvent and Coordination Environment of Metal Source on the Self-Assembly Pathway of a Pd(II)-mediated Coordination Capsule”, *Inorg. Chem.*, **56**, 12652-12663, (2017), [10.1021/acs.inorgchem.7b02152](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02152)
50. *N. Kungwan, C. Ngaojampa, Y. Ogata, T. Kawatsu, Y. Oba, Y. Kawashima, *M. Tachikawa, “Solvent Dependence of Double Proton Transfer in the Formic Acid Formamidinium Complex: Path Integral Molecular Dynamics Investigation”, *J. Phys. Chem. A*, **121** (39), 7324-7334, (2017), [10.1021/acs.jpca.7b07010](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b07010)
51. A. Naito, Y. Tasei, A. Nishiura, T. Asakura, “Unusual Dynamics of Alanine Residues in Poly(alanine) Region with Staggered Packing Structure of Samia Cynthia Ricini Silk Fiber in Dry and Hydrated States Studied by ¹³C Solid-state NMR and Molecular Dynamics Simulation”, *J. Phys. Chem. B*, **122**, 6511-6520, (2018), [10.1027/jacs.jpca.8b03509](https://doi.org/10.1027/jacs.jpca.8b03509)
52. Y. Makino, I. Kawamura, T. Okitsu, A. Wada, N. Kamo, Y. Sudo, K. Ueda, A. Naito, “Retinal Configuration of ppR Intermediates Revealed by Photo-irradiation Solid-state NMR and DFT”, *Biophys. J.*, **115**, 72-83, (2018), [10.1016/j.bpj.2018.05.030](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2018.05.030)
(*Biophys. J.* 115/1(2018) 7月3日号の表紙に採用)
53. A. Naito, K. Okushita, K. Nishimura, G. B. Boutis, A. Aoki, *T. Asakura, “Quantitative Analysis of Solid-state Homonuclear Correlation Spectra of Antiparallel β -sheet Alanine Tetramers”, *J. Phys. Chem. Chem. B*, **122**, 2715-2724, (2018), [10.1021/acs.jpca/b11126](https://doi.org/10.1021/acs.jpca/b11126)
54. B. Mijiddorj, S. Kaneda, H. Sato, Y. Kitahashi, N. Javkhantugs, A. Naito, K. Ueda, *I. Kawamura, “The Role of D-allo-isoleucine in the Deposition of the Anti-Leishmania Peptide Bombinin H4 as Revealed by ³¹P Solid-state NMR, VCD Spectroscopy, and MD Simulation”, *BBA-Proteins and Proteomics*, **1866**, 789-798, (2018), [10.1016/j.bbapap.2018.01.005](https://doi.org/10.1016/j.bbapap.2018.01.005)
55. 上田和義, *内藤晶, 川村出, “生体幕内でのペプチドの挙動の分子動力学シミュレーション,” *酵素工学ニュース*, **79**, 27-30, (2018)
56. *内藤 晶
“固体高分解能 NMR スペクトルに現れる異方性相互作用 –Narrow is beautiful–”, *分光研究* **67**, 13-15, (2018)
57. *A. Naito, N. Matsumori, A. Ramamoorthy, “Dynamic Membrane Interactions of Antibacterial and Antifungal Biomolecules, and Amyloid Peptides, Revealed by Solid-state NMR Spectroscopy”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 307-323,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- (2018), [10.1016/j.bbagen.2017.06.004](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.06.004)
58. *N. Yoshida, *M. Higashi, H. Motoki, S. Hirota, “Theoretical Analysis of the Domain-swapped Dimerization of Cytochrome *c*: An MD and 3D-RISM Approach”, *J. Chem. Phys.*, **148**, 025102, (7 pages), (2018), [10.1063/1.5009785](https://doi.org/10.1063/1.5009785)
59. 根木秀佳, 吉田紀生, 廣田俊, 東雅大, “シトクロム *c* の多量体形成に関する理論的研究”, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **17**, 8-13, (2018), [10.2477/jccj.2018-0006](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0006)
60. H. Tsukamoto, M. Higashi, H. Motoki, H. Watanabe, C. Ganser, K. Nakajo, Y. Kubo, T. Uchihashi, *Y. Furutani, “Structural Properties Determining Low K⁺ affinity of the Selectivity Filter in the TWIK1 K⁺ Channel”, *J. Biol. Chem.*, **293**, 6969-6984, [10.1074/jbc.RA118.001817](https://doi.org/10.1074/jbc.RA118.001817)
61. K. Nii, *M. Maruyama, S. Okada, H. Adachi, K. Takano, S. Murakami, H. Y. Yoshikawa, H. Matsumura, T. Inoue, M. Imanishi, K. Tsukamoto, M. Yoshimura, Y. Mori, “Improvement of Metastable Crystal of Acetaminophen via Control of Crystal Growth Rate”, *Appl. Phys. Express.*, **11**, 035501, (2018), [10.7567/APEX.11.035501](https://doi.org/10.7567/APEX.11.035501)
62. Y. Wakamiya, M. Ebine, M. Murayama, H. Omizu, N. Matsumori, M. Murata, *T. Oishi, “Synthesis and Stereochemical Revision of the C31-C67 Section of Amphidinol 3”, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **57**, 6060-6064, (2018), [10.1002/anie.201712167](https://doi.org/10.1002/anie.201712167)
63. T. Watanabe, H. Shibata, M. Ebine, H. Tsuchikawa, N. Matsumori, M. Murata, M. Yoshida, M. Morisawa, S. Lin, K. Yamauchi, K. Sakai, *T. Oishi, “Synthesis and Complete Structure Determination of a Sperm-Activating and -Attracting Factor Isolated from the Ascidian *Ascidia Sydneiensis*”, *J. Nat. Prod.*, **81**, 985-997, (2018), [10.1021/acs.jnatprod.7b01052](https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.7b01052)
64. T. Matsufuji, M. Kinoshita, A. Mouts, J. P. Slotte, *N. Matsumori, “Preparation and Membrane Properties of Oxidized Ceramide Derivatives”, *Langmuir*, **34**, 465-471, (2018), [10.1021/acs.langmuir.7b02654](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b02654)
65. M. Kinoshita, H. Ano, M. Murata, K. Shigetomi, J. Ikenouchi, *N. Matsumori, “Emphatic Visualization of Sphingomyelin-rich Domains by Inter-lipid FRET Imaging Using Fluorescent Sphingomyelins”, *Sci. Rep.*, **7**, 16801, (2017), [10.1038/s41598-017-16361-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-16361-x)
66. *R. Ohtani, T. Tokita, T. Takaya, *K. Iwata, M. Kinoshita, N. Matsumori, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “The Impact of Metal Complex Lipids on Viscosity and Curvature of Hybrid Liposomes”, *Chem. Commun.*, **53**, 13249-13252, (2017), [10.1039/c7cc07944c](https://doi.org/10.1039/c7cc07944c)
67. M. Iwamoto, A. Sumino, E. Shimada, M. Kinoshita, N. Matsumori, *S. Oiki, “Channel Formation and Membrane Deformation via Sterol-Aided Polymorphism of Amphidinol 3”, *Sci. Rep.* **7**, 10782, (2017). [10.1038/s41598-017-11135-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-11135-x)
68. *M. Satake, K. Cornelio, S. Hanashima, R. Malabed, M. Murata, N. Matsumori, H. Zhang, F. Hayashi, S. Mori, J.S. Kim, C.H. Kim, J.S. Lee, “Structures of the Largest



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Amphidinol Homologues from the Dinoflagellate *Amphidinium carterae* and Structure-Activity Relationships”, *J. Nat. Prod.*, **80**, 2883-2888, (2017), [10.1021/acs.jnatprod.7b00345](https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.7b00345)
69. *A. Naito, N. Matsumori, A. Ramamoorthy, “Dynamic Membrane Interactions of Antibacterial and Antifungal Biomolecules, and Amyloid Peptides, Revealed by Solid-state NMR Spectroscopy”, *Biochim. Biophys. Acta. (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 307-323, (2018), [10.1016/j.bbagen.2017.06.004](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.06.004)
70. Y. Umegawa, N. Matsumori, *M. Murata, “Recent Solid-State NMR Studies of Hydrated Lipid Membranes”, *Annual Reports on NMR Spectroscopy*, **94**, 41-72, (2018), [10.1016/bs.arnmr.2017.12.003](https://doi.org/10.1016/bs.arnmr.2017.12.003)
71. 松森信明
「脂質ラフトのNMR解析」, 日本核磁気共鳴学会機関紙, **8**, 9-16 (2017)
72. N. Ogawa, Y. Y. Yamamoto, K. Abe, H. Sekiguchi, Y. C. Sasaki, A. Ishikawa, J. Frydman, *M. Yohda, “Time-Resolved Measurement of the ATP-Dependent Motion of the Group II Chaperonin by Diffracted Electron Tracking”, *Int. J. Mol. Sci.*, **19**, E950, (2018), [10.3390/ijms19040950](https://doi.org/10.3390/ijms19040950)
73. M. Sahlan, T. Zako, *M. Yohda, “Prefoldin, a jellyfish-like Molecular Chaperone: Functional Cooperation with a Group II Chaperonin and Beyond”, *Biophys. Rev.*, **10**, 339, (2018), [10.1007/s12551-018-0400-0](https://doi.org/10.1007/s12551-018-0400-0)
74. S. Kai, M. Nakagawa, T. Kojima, X. Li, M. Yamashina, M. Yoshizawa, *S. Hiraoka, “Steric Interaction between Neighboring Components Favors the Formation of Large Intermediates in the Self-Assembly Process of a Pd₂L₄ Capsule”, *Chem. Eur. J.*, **24**, 3965–3969, (2018), [10.1002/chem.201705253](https://doi.org/10.1002/chem.201705253)
(selected as Hot Paper and Cover Feature)
75. T. Tateishi, W. Zhu, L. H. Foianesi-Takeshige, T. Kojima, K. Ogata, *S. Hiraoka “Self-assembly of a Pd₄L₈ Double-walled Square Partly Takes Place through the Formation of Kinetically Trapped Species”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2018**, 1192–1197, (2018), [10.1002/ejic.201800037](https://doi.org/10.1002/ejic.201800037)
76. Y. Matsumura, S. Iuchi, S. Hiraoka, *H. Sato, “Chiral Effects on the Final Step of an Octahedron-Shaped Coordination Capsule Self-Assembly”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 7383–7386, (2018), [10.1039/C7CP08237A](https://doi.org/10.1039/C7CP08237A)
(selected as Hot Paper and Back Cover,
77. T. Tateishi, T. Kojima, *S. Hiraoka, “Multiple Pathways in the Self-assembly Process of a Pd₄L₈ Coordination Tetrahedron”, *Inorg. Chem.*, **57**, 2686–2694, (2018), [10.1021/acs.inorgchem.7b03085](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b03085)
78. Y.-Y. Zhan, K. Ogata, T. Kojima, T. Koide, K. Ishii, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Uchiyama, *S. Hiraoka, “Hyperthermostable Cube-shaped Assembly in Water”, *Comms. Chem.*, **1**, 14, (2018), [10.1038/s42004-018-0014-2](https://doi.org/10.1038/s42004-018-0014-2)
79. S. Kai, S. P. Maddala, T. Kojima, S. Akagi, K. Harano, E. Nakamura, *S. Hiraoka “Flexibility of Components Alters the Self-assembly Pathway of Pd₂L₄ Coordination



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Cages”, *Dalton Trans.*, **47**, 3258–3263, (2018), [10.1039/C8DT00112J](https://doi.org/10.1039/C8DT00112J)
(selected as Outside Front Cover [\[PDF\]](#))
80. N. Tanaka, Y.-Y. Zhan, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Koide, T. Mashiko, U. Nagashima, [M. Tachikawa](#), [*S. Hiraoka](#), “Semi-quantitative Evaluation of Molecular Meshing by Surface Analysis with Varying Probe Radii”, *Chem. Commun.*, **54**, 3335–3338, (2018), [10.1039/c8cc00695d](https://doi.org/10.1039/c8cc00695d)
(selected as Back Cover [\[PDF\]](#))
81. [*R. Harada](#), T. Mashiko, [M. Tachikawa](#), [S. Hiraoka](#), [*Y. Shigeta](#), “Programed Dynamical Ordering in the Self-organization Processes of a Nanocube: A Molecular Dynamics Study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 9115–9122, (2018), [10.1039/C8CP00284C](https://doi.org/10.1039/C8CP00284C)
82. T. Tateishi, T. Kojima, [*S. Hiraoka](#), “Chiral Self-sorting Process in the Self-assembly of Homochiral Coordination Cages from Axially Chiral Ligands”, *Comms Chem.*, **1**, 20, (2018), [10.1038/s42004-018-0020-4](https://doi.org/10.1038/s42004-018-0020-4)
83. 増子貴子, [平岡秀一](#), 長嶋雲兵, [*立川仁典](#), “齒車状両親媒性分子からなるナノキューブの置換基効果と溶媒効果の理論的研究”, *J. Comp. Chem. Jpn.*, **17**, 31–37, (2018), [10.2477/jccj.2018-0010](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0010)
84. [*S. Hiraoka](#), “Unresolved Issues that Remain in Molecular Self-Assembly”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **91**, 957–987, (2018), [10.1246/bcsj.20180008](https://doi.org/10.1246/bcsj.20180008)
(Vol. 90 Commemorative Accounts: Self-Organization),
85. S. Kai, T. Kojima, F. L. Thorp-Greenwood, M. J. Hardie, [*S. Hiraoka](#), “How Does Chiral Self-sorting Take Place in the Formation of Homochiral Pd₆L₈ Capsules Consisting of Cyclotrimeratrylene-based Chiral Tritopic Ligands?”, *Chem. Sci.*, **9**, 4104–4108, (2018), [10.1039/C8SC01062E](https://doi.org/10.1039/C8SC01062E)
86. Y.-Y. Zhan, N. Tanaka, Y. Ozawa, T. Kojima, T. Mashiko, U. Nagashima, [M. Tachikawa](#), [*S. Hiraoka](#), “Importance of Molecular Meshing for the Stabilization of Solvophobic Assemblies”, *J. Org. Chem.*, **83**, 5132–5137, (2018), [10.1021/acs.joc.8b00495](https://doi.org/10.1021/acs.joc.8b00495)
87. Y.-Y. Zhan, T. Kojima, T. Koide, [M. Tachikawa](#), [*S. Hiraoka](#), “A Balance Between van der Waals and Cation- π Interactions That Stabilizes Hydrophobic Assemblies”, *Chem. Eur. J.*, **83**, 5132–5137, (2018), [10.1002/chem.201801376](https://doi.org/10.1002/chem.201801376)
88. M. Nakagawa, S. Kai, T. Kojima, [*S. Hiraoka](#), “Energy-Landscape-Independent Kinetic Trap of Incomplete Cage in the Self-assembly of a Pd₂L₄ Cage”, *Chem. Eur. J.*, **24**(35), 8696–8696, (2018), [10.1002/chem.201802740](https://doi.org/10.1002/chem.201802740)
(selected as Hot Paper)
89. 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**, 6290–6294, (2017), [10.1002/chem.201701348](https://doi.org/10.1002/chem.201701348)
90. Y. Matsumura, S. Iuchi, [S. Hiraoka](#), [*H. Sato](#), “Chiral Effects on the Final Step of an Octahedron-shaped Coordination Capsule Self-assembly”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 7383–7386, (2018), [10.1039/C7CP08237A](https://doi.org/10.1039/C7CP08237A)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

91. Y. Matsumura, S. Hiraoka, *H. Sato, “A Reaction Model on the Self-assembly Process of Octahedron-shaped Coordination Capsules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 20338–20342, (2017), [10.1039/c7cp03493h](https://doi.org/10.1039/c7cp03493h)
92. A. Baba, T. Kojima, *S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-Assembly Process of Hexagonal Pt(II) Macrocyclic Complexes: Effect of Solvent and Components”, *Chem. Eur. J.*, **24**, 838–847, (2018), [10.1002/chem.201702955](https://doi.org/10.1002/chem.201702955)
(Hot Paper and Front Cover に選出)
93. S. Kai, V. Marti-Centelles, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, U. Nagashima, M. Tachikawa, P. J. Lusby, and *S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-Assembly Process of a Pd₂L₄ Cage Consisting of Rigid Ditopic Ligands”, *Chem. Eur. J.*, **24**, 663–671, (2018), [10.1002/chem.201704285](https://doi.org/10.1002/chem.201704285)
94. S. Kai, T. Shigeta, T. Kojima, *S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-assembly Process of a Pd₁₂L₂₄ Coordination Sphere”, *Chem. Asian J.*, **12**, 3203–3207, (2017), [10.1002/asia.201701351](https://doi.org/10.1002/asia.201701351)
95. Y. Mori, *H. Okumura, T. Watanabe, T. Hohsaka, “Antigen-dependent Fluorescence Response of Anti-c-Myc Quenchbody Studied by Molecular Dynamics Simulations”, *Chem. Phys. Lett.*, **698**, 223–226, (2018), [10.1016/j.cplett.2018.03.011](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.03.011)
96. M. Yamaguchi, E. Ohta, T. Muto, T. Watanabe, T. Hohsaka, Y. Yamazaki, H. Kamikubo, *M. Kataoka, “Statistical Description of the Denatured Structure of a Single Protein, Staphylococcal Nuclease, by FRET Analysis”, *Biophys. Rev.*, **10**, 145–152, (2018), [10.1007/s12551-017-0334-y](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0334-y)
97. K. Ikemoto, J. Lin, R. Kobayashi, S. Sato, H. Isobe, “Fluctuating Carbonaceous Networks with a Persistent Molecular Shape: A Saddle-Shaped Geodesic Framework of 1,3,5-Trisubstituted Benzene (Phenine)”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**, in press, (2018), [10.1002/anie.201803984](https://doi.org/10.1002/anie.201803984)
98. T. Matsuno, Y. Nakai, S. Sato, Y. Maniwa, *H. Isobe, “Ratchet-Free Solid-State Inertial Rotation of a Guest Ball in a Tight Tubular Host”, *Nature Commun.* **9**, 1907, (2018), [10.1038/s41467-018-04325-2](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04325-2)
99. *Y. Nagata, T. Nishikawa, M. *Suginome, S. Sato, *M. Sugiyama, L. Porcar, A. Martel, R. Inoue, N. Sato “Elucidating the Solvent Effect on the Switch of the Helicity of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s: A Conformational Analysis by Small-Angle Neutron Scattering”, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 2722–2726, (2018). [10.1021/jacs.7b11626](https://doi.org/10.1021/jacs.7b11626)
100. S.-T. Pham, K. Ikemoto, K. Z. Suzuki, T. Izumi, H. Taka, H. Kita, S. Sato, H. Isobe, *S. Mizukami, “Magneto-Electroluminescence Effects in the Single-Layer Organic Light-Emitting Devices with Macrocyclic Aromatic HydrocarbonsQ”, *APL Materials*, **6**, 026103, (2018), [10.1063/1.5021711](https://doi.org/10.1063/1.5021711) (Editor's Pick に選出)
101. N. Miyamoto, Y. Nakazawa, T. Nakamura, K. Okano, S. Sato, Z. Sun, H. Isobe, *H. Tokuyama “Synthesis of 9,10-Diarylanthracenes via Mg(TMP)₂·2LiCl-Mediated Benzyne Generation/[4+2] Cycloaddition and Deoxygenation of 9,10-



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Epoxyanthracene Intermediates”, *Synlett*, **29**, 513-518, (2017), [10.1055/s-0036-1591510](https://doi.org/10.1055/s-0036-1591510)
102. T. Matsuno, K. Kogashi, S. Sato, *H. Isobe “Enhanced yet Inverted Effects of π -Extension in Self-Assembly of Curved π -Systems with HelicityA”, *Org. Lett.*, **19**, 6456-6459, (2017), [10.1021/acs.orglett.7b03534](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.7b03534)
103. 佐藤宗太, 磯部寛之, “大環状芳香族分子のナノ細孔結晶を活用した全固体リチウムイオン電池の高容量電極材料” 応用物理 (研究紹介), 2017, vol. 86, No. 12, p. 1065-1068
104. N. Kobayashi, K. Inano, K. Sasahara, T. Sato, K. Miyazawa, T. Fukuma, M. H. Hecht, C. Song, K. Murata, *R. Arai, “Self-Assembling Supramolecular Nanostructures Constructed from *de Novo* Extender Protein Nanobuilding Blocks”, *ACS Synth. Biol.*, **7**, 1381-1394, (2018), [10.1021/acssynbio.8b00007](https://doi.org/10.1021/acssynbio.8b00007)
105. *R. Arai, “Hierarchical Design of Artificial Proteins and Complexes toward Synthetic Structural Biology”, *Biophys. Rev.*, **10**, 391-410 (2018), [10.1007/s12551-017-0376-1](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0376-1)
106. A. Nakamura, T. Tasaki, Y. Okuni, C. Song, K. Murata, T. Kozai, M. Hara, H. Sugimoto, K. Suzuki, T. Watanabe, T. Uchihashi, H. Noji, *R. Iino, “Rate Constants, Processivity, and Productive Binding Ratio of Chitinase A Revealed by Single-molecule Analysis”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3010-3018, (2018), [10.1039/C7CP04606E](https://doi.org/10.1039/C7CP04606E)
(裏表紙に採用)
107. Y. Oda, *J. Chiba, *M. Inouye, “Synthesis of Alkynyl C-Nucleotide Triphosphates Toward Enzymatic Elongation of Artificial DNA”, *Heterocycles*, published online, [10.3987/COM-18-S\(T\)48](https://doi.org/10.3987/COM-18-S(T)48)
108. *H. Abe, C. Sato, Y. Ohishi, *M. Inouye, “Metathesis-Based Stapling of a Pyridine-Acetylene-Phenol Oligomers Having Alkenyl Side Chains after Intermolecular Templatation by Native Saccharides”, *Eur. J. Org. Chem.*, published online, [10.1002/ejoc.201800531](https://doi.org/10.1002/ejoc.201800531)
109. I. Sakaguchi, T. Fukasawa, K. Fujimoto, *M. Inouye, “Immobilization of Crosslinked Peptides that Possess High helical Contents and their Binding to Target DNAs on Au Surfaces”, *Chem. Lett.*, **83**, 3132, (2018), [10.1246/cl.171153](https://doi.org/10.1246/cl.171153)
110. A. Yoshizawa, *M. Inouye, “A Bis(phenylethynyl)pyrene-Based [3]Rotaxane as an Extremely Photostable Fluorescence Probe Suitable for Hard-edged Irradiation Experiments”, *ChemPhotoChem.*, **2**, 353, (2018), [10.1002/cptc.201700223](https://doi.org/10.1002/cptc.201700223)
111. Y. Ohishi, H. Abe, *M. Inouye, “Saccharide Recognition and Helix Formation in Water with an Amphiphilic Pyridine-Phenol Alternating Oligomer”, *Eur. J. Org. Chem.*, **2017**(46), 6975-6979, (2017), [10.1002/ejoc.201701522](https://doi.org/10.1002/ejoc.201701522)
112. S. Hirokane, S. Takashima, *H. Abe, *M. Inouye, “Helix-Rotaxane Hybrid Systems: Rotaxane-Stabilized, Saccharide-induced Chiral Ethynylpyridine Helices by Thermodynamic Process”, *Eur. J. Org. Chem.*, **762**, (2017), [10.1002/ejoc.201601323](https://doi.org/10.1002/ejoc.201601323)
113. H. Negishi, *S. Abe, K. Yamashita, K. Hirata, K. Niwase, M. Boudes, F. Coulibaly, H. Mori, *T. Ueno, “Supramolecular Protein



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Cages Constructed from a Crystalline Protein Matrix”, *Chem. Commun.*, **54**, 1988-1991, (2018), [10.1039/C7CC08689J](https://doi.org/10.1039/C7CC08689J)
114. H. Tabe, H. Takahashi, T. Shimoi, S. Abe, *T. Ueno, *Y. Yamada, “Photocatalytic Hydrogen Evolution Systems Constructed in Cross-linked Porous Protein Crystals”, *Appl. Catal., B*, in press, (2018), [10.1016/j.apcatb.2018.01.046](https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2018.01.046)
115. S. Ryu, Y. Matsumoto, T. Matsumoto, T. Ueno, Y. R. Silberberg, *C. Nakamura, “Improved Efficiency of Nanoneedle Insertion by Modification with a Cell-puncturing Protein”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **57**, 03EB02, (2018), [10.7567/JJAP.57.03EB02](https://doi.org/10.7567/JJAP.57.03EB02)
116. T. K. Nguyen, *T. Ueno, “Engineering of Protein Assemblies within Cells”, *Curr. Opin. Struct. Biol.*, **51**, 1-8, (2018), [10.1016/j.sbi.2017.12.005](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2017.12.005)
117. S. Abe, B. Maity, T. Ueno, “Functionalization of Protein Crystals with Metal Ions, Complexes and Nanoparticles”, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, **43**, 68-76, (2017), [10.1016/j.cbpa.2017.11.015](https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2017.11.015)
118. H. Inaba, T. Ueno, “Artificial bio-nanomachines Based on Protein Needles Derived from Bacteriophage T4”, *Biophys. Rev.*, **10**, 641-658, (2017), [10.1007/s12551-017-0336-9](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0336-9)
119. S. Abe, K. Atsumi, K. Yamashita, K. Hirata, H. Mori, T. Ueno, “Structure of in Cell Protein Crystals Containing Organometallic Complexes”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 2986-2989, (2017), [10.1039/C7CP06651A](https://doi.org/10.1039/C7CP06651A)
120. 安部聡、上野隆史
「超分子タンパク質の分子設計によるバイオハイブリッド材料の開発」, 有機合成化学協会誌,
75 巻, (2017), 12 号, 1264-1273,
[10.5059/yukigoseikyokaisi.75.1264](https://doi.org/10.5059/yukigoseikyokaisi.75.1264)
ACS nano YouTube にビデオ掲載
<https://www.youtube.com/watch?v=6hwINO5aywk&feature=youtu.be>
121. *R. Ohtani, T. Tokita, T. Takaya, *K. Iwata, M. Kinoshita, N. Matsumori, M. Nakamura, L. F. Lindoy, *S. Hayami, “The Impact of Metal Complex Lipids on Viscosity and Curvature of Hybrid Liposomes”, *Chem. Commun.*, **53**, 13249-13252, (2017), [10.1039/C7CC07944C](https://doi.org/10.1039/C7CC07944C)
122. *T. Katayama, K. Kasho, H. Kawakami, “The DnaA cycle in *Escherichia coli*: Activation, Function and Inactivation of the Initiator Protein”, *Front. Microbiol.*, **8**, 2496, (2017), [10.3389/fmicb.2017.02496](https://doi.org/10.3389/fmicb.2017.02496)
123. *Y. Kamiya, Y. Arimura, H. Ooi, K. Kato, X.G. Liang, *H. Asanuma, “Development of Visible Light-responsive RNA Scissors Based on the 10-23 DNAzyme”, *ChemBioChem.*, **19**, 1305-1311, (2018), accepted
124. *Y. Kamiya, Y. Yamada, T. Muro, K. Matsuura, *H. Asanuma, “DNA Microcapsule for Photo-triggered Drug Release System”, *ChemMedChem.*, **12**, 2016-2021, (2017), [10.1002/cmdc.201700512](https://doi.org/10.1002/cmdc.201700512)
(フロントカバーイラストレーションに採用)
125. H. Minato, M. Murai, T. Watanabe, S. Matsui, M. Takizawa, *T. Kureha, *D. Suzuki, “The Deformation of Hydrogel



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Microspheres at the Air/Water Interface”, *Chem. Commun.*, **54**, 932-935, (2018), [10.1039/C7CC09603H](https://doi.org/10.1039/C7CC09603H)
126. S. Minami, T. Watanabe, *[D. Suzuki](#), *[K. Urayama](#), “Viscoelasticity of Dense Suspensions of Thermosensitive Microgel Mixtures Undergoing Colloidal Gelation”, *Soft Matter*, **14**, 1596-1607, (2018), [10.1039/C7SM02411H](https://doi.org/10.1039/C7SM02411H)
127. M. Takizawa, Y. Sazuka, K. Horigome, Y. Sakurai, S. Matsui, H. Minato, T. Kureha, *[D. Suzuki](#), “Self-organization of Soft Hydrogel Microspheres during the Evaporation of Aqueous Droplets”, *Langmuir*, accepted (2018), [10.1021/acs.langmuir.8b00230](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b00230)
128. T. Kureha, *[D. Suzuki](#), “Nanocomposite Microgels for the Selective Separation of Halogen Compounds from Aqueous Solution”, *Langmuir*, **34**, 837-846, (2018), [10.1021/acs.langmuir.7b01485](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01485)
(Invited article for special issue, “Early Career Authors in Fundamental Colloid and Interface Science に選出)
129. T. Kureha, D. Aoki, S. Hiroshige, K. Iijima, D. Aoki, *[T. Takata](#), *[D. Suzuki](#), “Decoupled Thermo- and pH-responsive Hydrogel Microspheres Cross-linked by Rotaxane Networks”, *Angew. Chem. Intl. Ed.*, **56**, 15393-15396, (2017), [10.1002/ange.201709633](https://doi.org/10.1002/ange.201709633)
(Very Important Paper に選出)
130. *[D. Suzuki](#), “Control of Spatio-temporal Structures for Polymeric Hydrogel Microspheres”, *高分子*, **66**, 6, (2017)
131. *[M. Imanishi](#), S. Tsuji, A. Suda, [S. Futaki](#), “Detection of *N*⁶-methyladenosine Based on the Methyl-sensitivity of MazF RNA Endonuclease”, *Chem. Commun.*, **53**, 12930, (2017), [10.1039/c7cc07699a](https://doi.org/10.1039/c7cc07699a)
132. K. Shinoda, S. Tsuji, [S. Futaki](#), *[M. Imanishi](#), “Nested PUF Proteins: Extending Target RNA Elements for Gene Regulation”, *ChemBioChem.*, **19**, 171, (2018), [10.1002/cbic.201700458](https://doi.org/10.1002/cbic.201700458)
133. K. Sakagami, T. Masuda, [K. Kawano](#), *[S. Futaki](#), “Importance of Net Hydrophobicity in the Cellular Uptake of All-hydrocarbon Stapled Peptides”, *Mol. Pharm.*, **15**, 1332, (2018), [10.1021/acs.molpharmaceut.7b01130](https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.7b01130)
134. M. Iwamoto, M.A. Elfaramawy, M. Yamatake, [T. Matsuura](#), [S. Oiki](#), “Concurrent In Vitro Synthesis and Functional Detection of Nascent Activity of the KcsA Channel under a Membrane Potential”, *ACS Synth Biol*, **7**, 1004-1011, (2018), [10.1021/acssynbio.7b00454](https://doi.org/10.1021/acssynbio.7b00454)
135. T. Suzuki, M. Kajino, S. Yanaka, T. Zhu, H. Yagi, T. Satoh, T. Yamaguchi, *[K. Kato](#), “Conformational Analysis of a High-Mannose-type Oligosaccharide Displaying Glucosyl Determinant Recognised by Molecular Chaperones Using NMR-validated Molecular Dynamics Simulation”, *ChemBioChem.*, **18**, 396-410, (2017), [10.1002/cbic.201600595](https://doi.org/10.1002/cbic.201600595)
136. T. Yoshimura, A. Hayashi, M. Handa-Narumi, H. Yagi, N. Ohno, T. Koike, [Y. Yamaguchi](#), K. Uchiyama, K. Kadomatsu, J. Sedzik, K. Kitamura, [K. Kato](#), B.D. Trapp, H. Baba, *[K. Ikenaka](#), “GlcNAc6ST-1 Regulates Sulfation of N-glycans and Myelination in the Peripheral Nervous System”, *Sci. Rep.*, **7**,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- 42257, (2017), [10.1038/srep42257](https://doi.org/10.1038/srep42257)
137. M. Nagae, S. K. Mishra, M. Neyazaki, R. Oi, A. Ikeda, N. Matsugaki, S. Akashi, H. Many, M. Mizuno, H. Yagi, K. Kato, T. Senda, T. Endo, T. Nogi, *Y. Yamaguchi, “3D structural Analysis of Protein O-mannosyl Kinase, POMK, a Causative Gene Product of Dystroglycanopathy”, *Genes Cells*, **22**, 348-359, (2017), [10.1111/gtc.12480](https://doi.org/10.1111/gtc.12480)
138. S. Sawaguchi, S. Varshney, M. Ogawa, Y. Sakaidani, H. Yagi, K. Takeshita, T. Murohara, K. Kato, S. Sundaram, P. Stanley, *T. Okajima, “GlcNAc on NOTCH1 EGF Repeats Regulates Ligand-induced Notch Signaling and Vascular Development in Mammals”, *eLife*, **6**, e24419, (2017), [10.7554/eLife.24419](https://doi.org/10.7554/eLife.24419)
139. E. Kurimoto, T. Satoh, Y. Ito, E. Ishihara, K. Okamoto, M. Yagi-Utsumi, K. Tanaka, *K. Kato, “Crystal Structure of Human Proteasome Assembly Chaperone PAC4 Involved in Proteasome Formation”, *Protein Sci.*, **26**, 1080-1085, (2017), [10.1002/pro.3153](https://doi.org/10.1002/pro.3153)
140. T. Kato, N. Kako, K. Kikuta, T. Miyazaki, S. Kondo, H. Yagi, K. Kato, *E. Y. Park, “N-Glycan Modification of a Recombinant Protein via Coexpression of Human Glycosyltransferases in Silkworm Pupae”, *Sci. Rep.*, **7**, 1409, (2017), [10.1038/s41598-017-01630-6](https://doi.org/10.1038/s41598-017-01630-6)
141. 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.*, **12**, 968-972, (2017), [10.1002/asia.201700202](https://doi.org/10.1002/asia.201700202)
142. T. Kato, K. Kikuta, A. Kanematsu, S. Kondo, H. Yagi, K. Kato, *E. Y. Park, “Alteration of a Recombinant Protein N-glycan Structure in Silkworms by Partial Suppression of N-acetylglucosaminidase Gene Expression”, *Biotechnol. Lett.*, **39**, 1299-1308, (2017), [10.1007/s10529-017-2361-y](https://doi.org/10.1007/s10529-017-2361-y)
143. H. Yagi, H. Tateno, K. ayashi, T. Hayashi, K. Takahashi, J. Hirabayashi, K. Kato, *M. Tsuboi, “Lectin Microarray Analysis of Isolated Polysaccharides from *Sasa Veitchii*”, *Biosci. Biotechnol. Biochem.*, **81**, 1687-1689, (2017), [10.1080/09168451.2017.1340089](https://doi.org/10.1080/09168451.2017.1340089)
144. R. Yogo, S. Yanaka, H. Yagi, A. Martel, L. Porcar, Y. Ueki, R. Inoue, N. Sato, M. Sugiyama, *K. Kato, “Characterization of Conformational Deformation-coupled Interaction between Immunoglobulin G1 Fc Glycoprotein and a Low-affinity Fcγ Receptor by Deuteration-assisted Small-angle Neutron Scattering”, *Biochem. Biophys. Rep.*, **12**, 1-4, (2017), [10.1016/j.bbrep.2017.08.004](https://doi.org/10.1016/j.bbrep.2017.08.004)
145. T. Satoh, C. Song, T. Zhu, T. Toshimori, K. Murata, Y. Hayashi, H. Kamikubo, T. Uchihashi, *K. Kato, “Visualisation of a Flexible Modular Structure of the ER Folding-sensor Enzyme UGGT”, *Sci. Rep.*, **7**, 12142, (2017), [10.1038/s41598-017-12283-w](https://doi.org/10.1038/s41598-017-12283-w)
146. S. Kitazawa, M. Yagi-Utsumi, K. Kato, *R. Kitahara, “Interactions Controlling the Slow Dynamic Conformational Motions of Ubiquitin”, *Molecules*, **22**, 1414, (2017), [10.3390/molecules22091414](https://doi.org/10.3390/molecules22091414)
147. S. Yanaka, T. Yamazaki, R. Yogo, M.



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Noda, S. Uchiyama, H. Yagi, *K. Kato,
“NMR Detection of Semi-specific Antibody
Interactions in Serum Environments”,
Molecules, **22**, 1619, (2017),
[10.3390/molecules22101619](https://doi.org/10.3390/molecules22101619)
148. Y. Sakae, T. Satoh, H. Yagi, S. Yanaka, T. Yamaguchi, Y. Isoda, S. Iida, Y. Okamoto,
*K. Kato, “Conformational Effects of N-
glycan Core fucosylation of Immunoglobulin
G Fc Region on its Interaction with Fcγ
Receptor IIIa”, *Sci. Rep.*, **7**, 13780, (2017),
[10.1038/s41598-017-13845-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-13845-8)
149. T. Takenaka, T. Nakamura, S. Yanaka, M. Yagi-Utsumi, M. S. Chandak, K. Takahashi,
S. Paul, K. Makabe, M. Arai, K. Kato, *K.
Kuwajima, “Formation of the Chaperonin
Complex Studied by 2D NMR
Spectroscopy”, *PLOS ONE*, **12**, e0187022,
(2017), [10.1371/journal.pone.0187022](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0187022)
150. T. Kozai, T. Sekiguchi, T. Satoh, H. Yagi, K. Kato, *T. Uchihashi, “Two-step Process for
Disassembly Mechanism of Proteasome α7
Homo-tetradecamer by α6 Revealed by High-
speed Atomic Force Microscopy”, *Sci. Rep.* **7**,
15373, (2017), [10.1038/s41598-017-15708-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-15708-8)
151. 矢木宏和, *加藤晃一, 「NMR を利用し
て糖タンパク質糖鎖の構造動態と相互作用
を観る」, *医学のあゆみ*, **262**, 467-473,
(2017)
152. H. Yagi, G. Yan, T. Suzuki, S. Tsuge, T. Yamaguchi, *K. Kato, “Lewis X-carrying
Neoglycolipids Evoke Selective Apoptosis in
Neural Stem Cells”, *Neurochem. Res.*, **43**,
212-218, (2018),
[10.1007/s11064-017-2415-5](https://doi.org/10.1007/s11064-017-2415-5)
153. M. Yagi-Utsumi, A. Sikdar, T. Kozai, R.
Inoue, M. Sugiyama, T. Uchihashi, H. Yagi,
T. Satoh, d *K. Kato, “Conversion of
Functionally Undefined Homopentameric
Protein PbaA into a Proteasome Activator by
Mutational Modification of its C-terminal
Segment Conformation”, *Protein Eng. Des.
Sel.*, **31**, 29-36, (2018),
[10.1093/protein/gzx066](https://doi.org/10.1093/protein/gzx066)
154. J. Kicuntod, K. Sangpheak, M. Mueller, P.
Wolschann, H. Viernstein, S. Yanaka, *K. Kato, W. Chavasiri, P. Pongsawasdi, N.
Kungwan, T. Rungrotmongkol, “Theoretical
and Experimental Studies on Inclusion
Complexes of Pinostrobin and β-
Cyclodextrins”, *Sci. Pharm.*, **86**, 5, (2018),
[10.3390/scipharm86010005](https://doi.org/10.3390/scipharm86010005)
155. H. Yagi, D. Takakura, L. T. Roumenina, W.
H. Fridman, C. Sautès-Fridman, N.
Kawasaki, *K. Kato, “Site-specific N-
glycosylation Analysis of Soluble Fcγ
Receptor IIIb in Human Serum”, *Sci. Rep.*, **8**,
2719, (2018), [10.1038/s41598-018-21145-y](https://doi.org/10.1038/s41598-018-21145-y)
156. K. Kato, T. Furuhashi, K. Kato, A. Oda, *E.
Kurimoto, “The Assembly Mechanism of
Coiled-coil Domains of the Yeast Cargo
Receptors Emp46p/47p and the Mutational
Alteration of pH-dependency of Complex
Formation”, *J Biochem.*, **163**, 441-446,
(2018), [10.1093/jb/mvy011](https://doi.org/10.1093/jb/mvy011)
157. R. Yogo, S. Yanaka, *K. Kato, “Backbone ¹H,
¹³C, and ¹⁵N Assignments of the Extracellular
Region of Human Fcγ Receptor IIIb”,
Biomol. NMR Assign., **12**. 201-204, (2018),
[10.1007/s12104-018-9809-4](https://doi.org/10.1007/s12104-018-9809-4)
158. K. Mukaigasa, T. Tsujita, V. Thanh Nguyen,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- L. Li, H. Yagi, Y. Fuse, Y. Nakajima-Takagi, K. Kato, M. Yamamoto, *M. Kobayashi, “Nrf2 Activation Attenuates Genetic Endoplasmic Reticulum Stress Induced by a Mutation in the Phosphomannomutase 2 Gene in Zebrafish”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **115**, 2758-2763, (2018), [10.1073/pnas.1714056115](https://doi.org/10.1073/pnas.1714056115)
159. S. Yanaka, H. Yagi, R. Yogo, M. Yagi-Utsumi, *K. Kato, “Stable Isotope Labeling Approaches for NMR Characterization of Glycoproteins Using Eukaryotic Expression Systems”, *J. Biomol. NMR*, in press, (2018), [10.1007/s10858-018-0169-2](https://doi.org/10.1007/s10858-018-0169-2)
160. T. Ikeya, D. Ban, D. Lee, Y. Ito, K. Kato, *Christian Griesinger, “Solution NMR Views of Dynamical Ordering of Biomacromolecules”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 287-306 (2018), [10.1016/j.bbagen.2017.08.020](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.08.020)
161. K. Kurihara, M. Matsuo, *T. Yamaguchi, *S. Sato, “Synthetic Approach to biomolecular science by cyborg supramolecular chemistry,” *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 358, (2018), [10.1016/j.bbagen.2017.11.002](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.11.002)
162. K. Matsuzaki, K. Kato, *K. Yanagisawa, “Ganglioside-mediated Assembly of Amyloid β -protein: Roles in Alzheimer's Disease”, *Prog. Mol. Biol. Transl. Sci.*, **156**, 413-434, (2018), [10.1016/bs.pmbts.2017.10.005](https://doi.org/10.1016/bs.pmbts.2017.10.005)
163. S. Kawano, Y. Tamura, R. Kojima, S. Bala, E. Asai, A.H. Michel, B. Kornmann, I. Riezman, H. Riezman, Y. Sakae, Y. Okamoto, *T. Endo, “Structure-function Insights into Phospholipid Transfer by Mmml1-Mdm12 of ERMES between Membranes”, *J. Cell Biol.*, **217**, 959-974, (2018), [10.1083/jcb.201704119](https://doi.org/10.1083/jcb.201704119)
164. S. Tsukamoto, Y. Sakae, Y. Itoh, T. Suzuki, *Y. Okamoto, “Computational Analysis for Selectivity of Histone Deacetylase Inhibitor by Replicaexchange Umbrella Sampling Molecular Dynamics Simulations”, *J. Chem. Phys.*, **148**, 125102, (6 pages), (2018), [10.1063/1.5019209](https://doi.org/10.1063/1.5019209)
165. S. Ito, D.G. Fedorov, *Y. Okamoto, *S. Irle, “Implementation of Replica-exchange Umbrella Sampling in GAMESS”, *Comput. Phys. Commun.*, **228**, 152-162, (2018), [10.1016/j.cpc.2018.01.014](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.01.014)
166. K. Abe, H. Katsuno, M. Toriyama, K. Baba, T. Mori, T. Hakoshima Y. Kanemura, R. Watanabe, *N. Inagaki, “Grip and slip of L1-CAM on Adhesive Substrates Direct Growth Cone Haptotaxis”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **115**, 2764-2769, (2018), [10.1073/pnas.1711667115](https://doi.org/10.1073/pnas.1711667115)
167. T. Uchihashi, Y.H. Watanabe, Y. Nakazaki, T. Yamasaki, H. Watanabe, T. Maruno, K. Ishii, S. Uchiyama, C. Song, K. Murata, *R. Iino, T. Ando, “Dynamic Structural States of ClpB Involved in its Disaggregation function”, *Nat. Commun.*, **9**, 2147, (2018), [10.1038/s41467-018-04587-w](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04587-w)
168. Y. Zhan, K. Ogata, T. Kojima, T. Koide, K. Ishii, T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Uchiyama, *S. Hiraoka, “Hyperthermostable Cube-shaped Assembly in Water”, *Commun. Chem.*, **1**, 1-14, (2018), [10.1038/s42004-018-0014-2](https://doi.org/10.1038/s42004-018-0014-2)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

169. R. Kim, S. Kanamaru, T. Mikawa, C. Prévost, K. Ishii, K. Ito, S. Uchiyama, M. Oda, H. Iwasaki, S. K Kim, *M. Takahashi, “RecA Requires Two Molecules of Mg²⁺ ions for its Optimal Strand Exchange Activity in Vitro”, *Nucleic Acids Res.*, **46**, 2548–2559, (2018), [10.1093/nar/gky048](https://doi.org/10.1093/nar/gky048)
170. T. Maruno, H. Watanabe, S. Yoneda, T. Uchihashi, S. Adachi K. Arai, T. Sawaguchi, * S. Uchiyama, “Sweeping of Adsorbed Therapeutic Protein on Prefillable Syringes Promotes Micron Aggregate Generation”, *J. Pharm. Sci.*, **107**, 1521-1529, (2018), [10.1016/j.xphs.2018.01.021](https://doi.org/10.1016/j.xphs.2018.01.021)
171. 石井健太郎、*内山 進，“タンパク質のネイティブ質量分析—動的なタンパク質複合体形成機構の解明にむけて—”, *ぶんせき*, **10**, 472-475, (2017)
172. M. Iwamoto, M.A. Elfaramawy, M. Yamatake, T. Matsuura, S.Oiki, “Concurrent *in vitro* Synthesis and Functional Detection of Nascent Activity of the KcsA Channel under the Membrane Potential”, *ACS Synth. Biol.*, **7** (4), 1004-1011, (2018), [10.1021/acssynbio.7b00454](https://doi.org/10.1021/acssynbio.7b00454)
173. S. Kojima, M. Iwamoto, S. Oiki, S. Tochigi, H. Takahashi, “Thylakoid Membranes Contain a Non-selective Channel Permeable to Small Organic Molecules”, *J. Biol. Chem.*, **293**, 7777-7785, (2018), [10.1074/jbc.RA118.002367](https://doi.org/10.1074/jbc.RA118.002367)
174. S. Oiki, M. Iwamoto, “Channel-Membrane Interplay in Lipid Bilayer Membranes Manipulated through Monolayer Technologies”, *Biol. Pharm. Bull.*, **41**, 303-311, (2018), [10.1248/bpb.b17-00708](https://doi.org/10.1248/bpb.b17-00708)
175. M. Kalathingal, T. Sumikama, T. Mori, S. Oiki, S. Saito, ”Structure and Dynamics of Solvent Molecules Inside Polytheonamide B Channel in Different Environments: A Molecular Dynamics Study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3334-3348, (2017), [10.1039/c7cp06299k](https://doi.org/10.1039/c7cp06299k)
176. 炭竈享司, 老木成稔, “チャネルの入口がイオンの透過速度を決める”, *生物物理* **58**,(1), 012-016, (2018), [10.2142/biophys.58.012](https://doi.org/10.2142/biophys.58.012)
177. Y. Mori, *H. Okumura, T. Watanabe, and T. Hohsaka, “Antigen-dependent Fluorescence Response of Anti-c-Myc Quenchbody Studied by Molecular Dynamics Simulations”, *Chem. Phys. Lett.*, **698**, 223, (2018), [10.1016/j.cplett.2018.03.01](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.03.01)
178. H. Nishizawa, *H. Okumura, “Classical Molecular Dynamics Simulation to Understand Uole of a Zinc Ion for Aggregation of Amyloid- β Peptides”, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **17**, 76, (2018), [10.2477/jccj.2018-0005](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0005)
179. Y. Hori, N. Otomura, A. Nishida, M. Nishiura, M. Umeno, I. Suetake, K. Kikuchi*, “Synthetic-Molecule/Protein Hybrid Probe with Fluorogenic Switch for Live-Cell Imaging of DNA Methylation”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, **140**, 1686-1690, [10.1021/jacs.7b09713](https://doi.org/10.1021/jacs.7b09713)
180. Y. Matsui, Y. Funato, H. Imamura, H. Miki, *S. Mizukami, *K. Kikuchi, “Visualization of Long-term Mg²⁺ Dynamics in Apoptotic Cells with a Novel Targetable Fluorescent Probe”, *Chem. Sci.*, **8**, 8255-8264, (2017), [10.1039/c7sc03954a](https://doi.org/10.1039/c7sc03954a)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

181. S. Magi, K. Iwamoto, N. Yumono, M. Hiroshima, T. Nagashima, R. Ohki, A. Garcia-Munoz, N. Volinsky, A. Von Kriegsheim, Y. Sako, K. Takahashi, S. Kimura, B. N. Kholodenko, *M. Okada-Hatakeyama, “Transcriptionally Inducible Pleckstrin Homology-like Domain Family A Member 1 Attenuates ErbB Receptor Activity by Inhibiting Receptor Oligomerization”, *J. Biol. Chem.*, **293**, 2206, (2018), [10.1074/jbcM117.778399](https://doi.org/10.1074/jbcM117.778399)
182. R. Maeda, T. Sato, K. Okamoto, M. Yanagawa, *Y. Sako, “Lipid-protein Interplay in Dimerization of the Juxtamembrane Domains of Epidermal Growth Factor Receptor”, *Biophys. J.*, **114**, 893, (2018), [10.1016/j.bpj.2017.12.029](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2017.12.029)
183. M. Hiroshima, C.-g. Pack, K. Kaizu, K. Takahashi, M. Ueda, *Y. Sako, “Transient Acceleration of Epidermal Growth Factor Receptor Dynamics Produces Higherorder Signaling Clusters”, *J. Mol. Biol.*, **430**(9), 1386-1401, (2018), [10.1016/j.jmb.2018.02.018](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2018.02.018)
184. *Y. Shindo, Y. Kondo, *Y. Sako, “Inferring a Nonlinear Biochemical Network Model from a Heterogeneous Single-cell Time Course Data”, *Sci. Rep.*, **8**, 6790 [10.1038/s41598-018-25064-w](https://doi.org/10.1038/s41598-018-25064-w)
185. R. Maeda, M. Hiroshima, T. Yamashita, A. Wada, Y. Sako, Y. Shichida, *Y. Imamoto, “Shift in Conformational Equilibrium Induces Constitutive Activity of G-Protein Coupled Receptor, Rhodopsin”, *J. Phys. Chem. B*, **122**, 4838-4843, [10.1021/acs.jpcc.8b02819](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b02819)
186. K. Okamoto., M. Hiroshima, *Y. Sako, “Single-molecule Fluorescence Based Analysis of Protein Conformation, Interaction, and Oligomerization in Cellular Systems”, *Biophys. Rev.*, **10**(2), 317-326, (2017), [10.1007/s12551-017-0366-3](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0366-3)
187. N. Takada, T. Naito, T. Inoue, K. Nakaama, H. Takatsu, *H.-W. Shin, “Phospholipid-Flipping Activity of P4-ATPase Drives Membrane Curvature”, *EMBO J.*, **37**, e97705, (2018), [10.15252/embj.201797705](https://doi.org/10.15252/embj.201797705)
188. *Y. Nagata, T. Nishikawa, *M. Suginome, S. Sato, *M. Sugiyama, L. Porcar, A. Martel, R. Inoue, N. Sato, “Elucidating the Solvent Effect on the Switch of the Helicity of Poly(quinoxaline-2,3-diyl): A Conformational Analysis by Small-Angle Neutron Scattering”, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 2722–2726, (2018), [10.1021/jacs.7b11626](https://doi.org/10.1021/jacs.7b11626)
189. M. Yagi-Utsumi, A. Sikdar, T. Kozai, R. Inoue, M. Sugiyama, T. Uchihashi, H. Yagi, T. Satoh, K. Kato, “Conversion of Functionally Undefined Homopentameric Protein PbaA into a Proteasome Activator by Mutational Modification of its C-terminal Segment Conformation”, *Protein Eng. Des.Sel.*, **31**, 29-36, (2018), [10.1093/protein/gzx066](https://doi.org/10.1093/protein/gzx066)
190. Z. Peng, M. Takeshita, N. Shibata, H. Tada, Y. Tanaka, *J. Kaneko, “Rim Domain Loops of Staphylococcal β -pore Forming Bi-component Toxin S-components 3 Recognize Target Human Erythrocytes in a Coordinated Manner”, *J. Biochem.*, Accepted (2018), [10.1093/jb/mvy030](https://doi.org/10.1093/jb/mvy030)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

191. *T. Uchida, T. Funamizu, M. Chen, Y. Tanaka, K. Ishimori, “Heme Binding to Porphobilinogen Deaminase from *Vibrio cholerae* Decelerates the Formation of 1-Hydroxymethylbilane”, *ACS Chem. Biol.*, **13**, 750-760, (2018), [10.1021/acscchembio.7b00934](https://doi.org/10.1021/acscchembio.7b00934)
192. *S. Kato, T. Matsui, C. Gatsogiannis, *Y. Tanaka, “Molluscan Hemocyanin: Structure, Evolution, and Physiology”, *Biophys. Rev.*, **10**, 191-202 (2018), [10.1007/s12551-017-0349-4](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0349-4)
193. M. Chen, M. Kubo, K. Kato, Y. Tanaka, Y. Liu, F. Long, W. Whitman, P. Lill, C. Gatsogiannis, S. Raunser, N. Shimizu, A. Shinoda, A. Nakamura, I. Tanaka, *M. Yao, “Structural basis for tRNA-dependent cysteine biosynthesis”, *Nature Commun.*, **8**, 1512, (2017), [10.1038/s41467-017-01543-y](https://doi.org/10.1038/s41467-017-01543-y)
194. 加藤早苗, 松井崇, *田中良和, “3.8MDaの超巨大酸素運搬蛋白質ヘモシアニン会合体の結晶構造,” 生化学, **90**, 238-243, (2018), [10.14952/SEIKAGAKU.2018.900238](https://doi.org/10.14952/SEIKAGAKU.2018.900238)
195. N. Yamamoto, S. Ito, M. Nakanishi, E. Chatani, K. Inoue, H. Kandori, K. Tominaga, “Effect of Temperature and Hydration Level on Purple Membrane Dynamics Studied Using Broadband Dielectric Spectroscopy from sub-GHz to THz Regions”, *J. Phys. Chem. B*, **122**, 1367-1377, (2018), [10.1021/acs.jpccb.7b10077](https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.7b10077)
196. N. Yamamoto, S. Tuhara, A. Tamura, *E. Chatani, “A Specific Form of Prefibrillar Aggregates that Functions as a Precursor of Amyloid Nucleation”, *Sci. Rep.* **8**, 62, (2018), [10.1038/s41598-017-18390-y](https://doi.org/10.1038/s41598-017-18390-y)
197. A. Nitani, H. Muta, M. Adachi, M. So, K. Sasahara, K. Sakurai, E. Chatani, K. Naoe, H. Ogi, D. Hall, *Y. Goto, “Heparin-dependent Aggregation of Hen Egg White Lysozyme Reveals two Distinct Mechanisms of Amyloid Fibrillation”, *J. Biol. Chem.*, **292**(52), 21219-21230, (2017), [10.1074/jbc.M117.813097](https://doi.org/10.1074/jbc.M117.813097)
198. E. Chatani, N. Yamamoto, “Recent Progress on Understanding the Mechanisms of Amyloid Nucleation”, *Biophys. Rev.*, **10**, 527-534, (2017), [10.1007/s12551-017-0353-8](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0353-8)
199. *T. Teramoto, C. Azai, K. Terauchi, M. Yoshimura, T. Ohta, “Soft X-ray Imaging of Cellular Carbon and Nitrogen Distributions in Heterocystous Cyanobacterium”, *Plant Physiology*, **177**, 52-61, [10.1104/pp.17.01767](https://doi.org/10.1104/pp.17.01767)
200. K. Oyama, C. Azai, J. Matsuyama, *K. Terauchi, “Phosphorylation at Thr432 Induces Structural Destabilization of the CII Ring in the Circadian Oscillator KaiC”, *EBS Lett.*, **592**, 36-45, (2018), [10.1002/1873-3468.12945](https://doi.org/10.1002/1873-3468.12945)
201. C. Azai, N. Kobayashi, T. Mizoguchi, H. Tamiaki, K. Terauchi, *Y. Tsukatani, “Rapid C8-vinyl Reduction of Divinyl-chlorophyllide a by BciA from *Rhodobacter capsulatus*”, *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, **353**, 661-666, (2018), [10.1016/j.jphotochem.2017.09.010](https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2017.09.010)
202. C. Wille, T. Eiseler, S. T. Langenberger, J. Richter, K. Mizuno, P. Radermacher, M. Huber-Lang, T. Seufferlein, S. Paschke,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- “PKD Regulates Actin Polymerization, Neutrophil Deformability and Transendothelial Migration in Response to fMLP and Trauma”, *J. Leukocyte Biol.*, in press, (2018), [10.1002/JLB.4A0617-251RR](https://doi.org/10.1002/JLB.4A0617-251RR)
203. S. Fujiwara, T. Matsui, K. Ohashi, S. Deguchi, *[K. Mizuno](#), “Solo, a RhoA-targeting Guanine Nucleotide Exchange Factor, is Critical for Hemidesmosome Formation and Acinar Development in Epithelial Cells”, *PLoS One*, **13**, e0195124, (2018), [10.1371/journal.pone.0195124](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0195124)
204. R. Nishimura, K. Kato, S. Fujiwara, K. Ohashi, *[K. Mizuno](#), “Solo and Keratin Filaments Regulate Epithelial Tubule Morphology”, *Cell Struc. Funct.*, **43**, 95-105, (2018), [10.1247/csf.18010](https://doi.org/10.1247/csf.18010)
205. K. Takahashi, T. Nagai, S. Chiba, K. Nakayama, *[K. Mizuno](#), “Glucose Deprivation Induces Primary Cilium Formation through mTORC1 Inactivation”, *J. Cell Sci.*, **131**, jcs208769, (2018), [10.1242/jcs.208769](https://doi.org/10.1242/jcs.208769)
206. [T. Uchihashi](#), Y. Watanabe, Y. Nakazaki, T. Yamasaki, H. Watanabe, T. Maruno, K. Ishii, [S. Uchiyama](#), C. Song, [K. Murata](#), R. Iino, T. Ando “Dynamic Structural States of ClpB Involved in Its Disaggregation Function”, *Nature Commun.*, **9**, 2147, (2018), [10.1038/s41467-018-04587-w](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04587-w)
207. *[K. Murata](#), Y. Kaneko, “Visualization of DNA Compaction in Cyanobacteria by High-voltage Cryo-electron Tomography”, *J. Visual. Exper.*, in press, (2018)
208. N. Kobayashi, K. Inano, K. Sasahara, T. Sato, K. Miyazawa, T. Fukuma, M. Hecht, C. Song, [K. Murata](#), R. Arai, “Self-Assembling Supramolecular Nanostructures Constructed from de Novo Extender Protein Nanobuilding Blocks”, *ACS Synth Biol.*, **7**, 1381-1394, (2018), [10.1021/acssynbio.8b00007](https://doi.org/10.1021/acssynbio.8b00007)
209. KK. Asare, M. Sakaguchi, AB. Lucky, M. Asada, S. Miyazaki, Y. Katakai, S. Kawai, S. Song, [K. Murata](#), K. Yahata, O. Kaneko, “The Plasmodium Knowlesi MAHRP2 Ortholog Localizes to Structures Connecting Sinton Mulligan's Clefts in the Infected Erythrocyte”, *Parasitol Int.*, **67**, 481-492, [10.1016/j.parint.2018.04.005](https://doi.org/10.1016/j.parint.2018.04.005)
210. *[K. Okamoto](#), N. Miyazaki, HKN. Reddy, MF. Hantke, FRNC. Maia, DSD. Larsson, C. Abergel, JM. Claverie, J. Hajdu, *[K. Murata](#), M. Svenda, “Cryo-EM Structure of a Marseilleviridae Virus Particle Reveals a Large Internal Microassembly”, *Virology*, **516**, 239-245, (2018), [10.1016/j.virol.2018.01.021](https://doi.org/10.1016/j.virol.2018.01.021) (ハイライトに採用)
211. 宋 致弘, *[村田 和義](#), 「クライオ電子顕微鏡によるタンパク質の動的構造解析」, *J. Comput. Chem. Japan*, **17**(1), 38-45, (2018), [10.2477/jccj.2018-0007](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0007)
212. A. Nakao, N. Miyazaki, K. Ohira, H. Hagihara, T. Takagi, N. Usuda, S. Ishii, [K. Murata](#), *T. Miyakawa, “Immature Morphological Properties in Subcellular-scale Structures in the Dentate Gyrus of Schnurri-2 Knockout Mice: a Model for Schizophrenia



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- and Intellectual Disability”, *Mol Brain*, **10**, 60, (2017), [10.1186/s13041-017-0339-2](https://doi.org/10.1186/s13041-017-0339-2)
213. A. Nakamura, T. Tasaki, Y. Okuni, C. Song, [K. Murata](#), T. Kozai, M. Hara, H. Sugimoto, K. Suzuki, T. Watanabe, [T. Uchihashi](#), H. Noji, [*R. Iino](#), “Rate Constants, Processivity, and Productive Binding Ratio of Chitinase A Revealed by Single-molecule Analysis”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 3010-3018, (2017), [10.1039/C7CP04606E](https://doi.org/10.1039/C7CP04606E)
214. 岡本健太, [*村田和義](#), 「巨大ウイルスの構造解析：クライオ電子顕微鏡の新たな挑戦」 特集「クライオ電子顕微鏡で見た生命のかたちとしくみ」, 実験医学, **36**, No.8 P.1344-1348 (2018) 羊土社
215. 片山和彦, 芳賀 慧, 藤本 陽, 戸田玲子, 村上耕介, [村田和義](#), 中西 章「ノロウイルス研究の最新知見」 感染制御と予防衛生, **1** No.1, P.4-11, (2017) , メディカルレビュー社
216. C. Shih, [J. J. Molina](#), [*R. Yamamoto](#), “Field-induced Dipolar Attraction between Like-charged Colloids”, *Soft Matter*, **12**, 914-924, (2018), [10.1039/C8SM00395E](https://doi.org/10.1039/C8SM00395E)
217. M. Shakeel, A. Hamid, A. Ullah, [J. J. Molina](#), [*R. Yamamoto](#), “Direct Numerical Simulations of Correlated Settling particles”, *J. Phys. Soc. Japan*, **87**, 064402, (2018), [10.7566/JPSJ.87.064402](https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.064402)
218. M. Tarama, [*R. Yamamoto](#), “Mechanics of cell crawling by means of force-free cyclic motion”, *J. Phys. Soc. Japan*, **87**, 044803, (2018), [10.7566/JPSJ.87.044803](https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.044803)
219. [*R. Yamamoto](#), [J.J. Molina](#), S.K. Schnyder, 「基板上で遊走・増殖する細胞集団のモデリング」 *J. Comput. Chem. Japan* **17**, 14, (2018), [10.2477/jccj.2018-0003](https://doi.org/10.2477/jccj.2018-0003)
220. [R. Harada](#), T. Mashiko, M. Tachikawa, S. Hiraoka, [*Y. Shigeta](#), “Programmed Dynamical Ordering in Self-organization Processes of Nano-cube: A Molecular Dynamics Study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 9115-9122, (2018), [10.1039/C8CP00284C](https://doi.org/10.1039/C8CP00284C)
221. R. Sato*, [R. Harada](#), [Y. Shigeta](#)*, “The binding structure and affinity of photodamaged duplex DNA with members of the photolyase/cryptochrome family: A computational study”, *Biophysics and Physicobiology* **15**, 18-27 (2018), [10.2142/biophysico.15.0_18](https://doi.org/10.2142/biophysico.15.0_18)
222. [*R. Harada](#), [*Y. Shigeta](#), “Self-Avoiding Conformational Sampling (SACS) Based on Histories of Past Conformational Searches”, *J. Chem. Inf. Model.*, **57**, 3070-3078, (2017), [10.1021/acs.jcim.7b00573](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.7b00573)
223. Y. Sasano, R. Sato, [Y. Shigeta](#), N. Yasuda, [*H. Maeda](#), “H-aggregated π -systems based on disulfide-linked dimers of dipyrrolyldiketone boron complexes”, *J. Org. Chem.*, **82**, 11166–11172, (2017), [10.1021/acs.joc.7b02185](https://doi.org/10.1021/acs.joc.7b02185)
224. [*R. Harada](#), [Y. Shigeta](#), “An Assessment of Optimal Time Scale of Conformational Resampling in Parallel Cascade Molecular Dynamics”, *Molecular Simulation*, **44**, 206-202, (2017), [10.1080/08927022.2017.1362696](https://doi.org/10.1080/08927022.2017.1362696)
225. A. Furukawa, S. Nakayama, K. Yoshikaie, [Y. Tanaka](#), [*T. Tsukazaki](#) T. “Remote Coupled Drastic β -Barrel to β -Sheet Transition of the Protein Translocation Motor,” *Structure* **26**, 485–489, (2018), [10.1016/j.str.2018.01.002](https://doi.org/10.1016/j.str.2018.01.002)
226. [*T. Tsukazaki](#), “Structure-based Working Model of SecDF, a Proton-driven Bacterial Protein Translocation Factor,” *FEMS*



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Microbiol. Lett.*, **365**, 12, (2018),
[10.1093/femsle/fny112](https://doi.org/10.1093/femsle/fny112)
227. Y. Nagata, * T. Nishikawa, M. Sugimoto, * S. Sato, M. Sugiyama, * L. Porcar, A. Martel, R. Inoue, N. Sato, “Elucidating the Solvent Effect on the Switch of the Helicity of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s: A Conformational Analysis by Small-Angle Neutron Scattering”, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 2722, (2018), [10.1021/jacs.7b11626](https://doi.org/10.1021/jacs.7b11626)
228. *Y. Zhen, K. Inoue, Z. Wang, T. Kusamoto, K. Nakabayashi, S. Ohkoshi, W. Hu, *Y. Guo, *K. Harano, *E. Nakamura, “Acid-Responsive Conductive Nanofiber of Tetrabenzoporphyrin Made by Solution Processing”, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 62-65, (2018), [10.1021/jacs.7b10575](https://doi.org/10.1021/jacs.7b10575)
(Cover picture に採択)
229. S. Kai, S. P. Maddala, T. Kojima, S. Akagi, K. Harano, E. Nakamura, *S. Hiraoka, “Flexibility of Components Alters the Self-assembly Pathway of Pd₂L₄ Coordination Cages”, *Dalton Trans.*, **47**, 3258-3263, (2018), [10.1039/C8DT00112J](https://doi.org/10.1039/C8DT00112J)
(Front Cover に採択)
230. S. Okada, S. Kowashi, L. Schweighauser, K. Yamanouchi, *K. Harano, *E. Nakamura, “Direct Microscopic Analysis of Individual C₆₀ Dimerization Events: Kinetics and Mechanisms”, *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 18281-18287 (2017), [10.1021/jacs.7b09776](https://doi.org/10.1021/jacs.7b09776)
231. P. Baire, *K. Minami, J. P. Hill, W. Nakanishi, *L. K. Shrestha, C. Liu, K. Harano, E. Nakamura, *K. Ariga, “Supramolecular Differentiation for Constructing Anisotropic Fullerene Nanostructures by Time-Programmed Control of Interfacial Growth”, *ACS Nano*, **10**, 8796–8802, (2016),
[10.1021/acsnano.6b04535](https://doi.org/10.1021/acsnano.6b04535)
232. R. M. Gorgoll, *K. Harano, *E. Nakamura, “Nanoscale Control of Polymer Assembly on a Synthetic Catalyst-Bilayer System”, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 9675–9681, (2016),
[10.1021/jacs.6b05414](https://doi.org/10.1021/jacs.6b05414)
233. S. Kaname, Y. Haketa, N. Yasuda, *H. Maeda, “Cyclic Anion-Responsive π -Electronic Molecules That Overcome Energy Losses Induced by Conformation Changes”, *Org. Lett.*, **20** (11), 3268-3272 (2018),
[10.1021/acs.orglett.8b01138](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.8b01138)
234. G. Hirata, *H. Maeda, “Pyrrole-Based Anion-Responsive π -Electronic Molecules as Hydrogen-Bonding Catalysts”, *Org. Lett.*, **20** (10), 2853-2856, (2018),
[10.1021/acs.orglett.8b00855](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.8b00855)
235. *H. Maeda, Y. Takeda, Y. Haketa, Y. Morimoto, N. Yasuda, “Ion-Pairing Assemblies of π -Electronic Anions Formed by Intramolecular Hydrogen Bonding”, *Chem. Eur. J.*, **24**, in press, (2018) [10.1002/chem.201801375](https://doi.org/10.1002/chem.201801375)
236. N. Oka, *F. Ito, Y. Haketa, *H. Maeda, T. Miyano, N. Tohnai, S. Ito, H. Miyasaka, S. Ozeki, “Dynamic Polymorph Formation During Evaporative Crystallization from Solution: The Key Role of Liquid-like Clusters as “Crucible” at Ambient Temperature”, *Chem. Eur. J.*, **24**(17), 4343-4349, (2018), [10.1002/chem.201705356](https://doi.org/10.1002/chem.201705356)
237. Y. Haketa, *H. Maeda, “Dimension-Controlled π -Electronic Ion-Pairing



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Assemblies”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **91**(3), 420-436, (2018), [10.1246/bcsj.20170434](https://doi.org/10.1246/bcsj.20170434)
238. R. Yamakado, M. Hara, S. Nagano, T. Seki, *[H. Maeda](#), “Complexation of Anion-Responsive π -Electronic System with Alkyl-Substituted Azobenzene Carboxylate Providing Ion-Pairing Assemblies”, *Chem. Lett.*, **47**(4), 404-407, (2018), [10.1246/cl.171128](https://doi.org/10.1246/cl.171128)
- 図書**
1. 光熱変換現象の時間分解検出と化学反応解析への応用
*[寺嶋正秀](#)、*分光研究*, **67**, 22-34, (2018)
 2. Ryo Akiyama, “Theoretical Studies of Strong Attractive Interaction Between Macro-anions Mediated by Multivalent Metal Cations and Related Association Behavior: Effective Interaction Between ATP-Binding Proteins Can Be Regulated by Hydrolysis”, *The Role of Water in ATP Hydrolysis Energy Transduction by Protein Machinery*, M. Suzuki ed., Chapter 4, *Springer Nature Singapore Pte Ltd.*, (2018), 53-67, [10.1007/978-981-10-8459-1_4](https://doi.org/10.1007/978-981-10-8459-1_4)
 3. [T. Ikeya](#), *Y. Ito, “Advances in NMR Data Acquisition and Processing for Protein Structure Determination, Experimental Approaches of NMR Spectroscopy - Methodology and Application to Life Science and Materials Science”, *Springer*, 63-99, (2018)
 4. [T. Uchihashi](#), H. Watanabe and N. Kodera “Optimum Substrates for Imaging Biological Molecules with High-speed Atomic Force Microscopy”, *Methods Mol. Biol. (in press)*.
 5. [T. Uchihashi](#) “High-Speed Atomic Force Microscopy”, *Compendium of Surface and Interface Analysis (The Surface Science Society of Japan, Eds) (Springer)*, pp. 263-267 (2018), [10.1007/978-981-10-6156-1](https://doi.org/10.1007/978-981-10-6156-1)
 6. 功刀 滋, [内藤 晶](#), “生命科学のための物理化学 15 講,” 講談社サイエンティフィック 編集, pp 1-244, (2018), ISBN978-4-06-153898-6
 7. *[I. Kawamura](#), K. Norisada, [A. Naito](#). “Structure Determination of Membrane Peptides and Proteins by Solid-state NMR”,



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

- Experimental Approaches of NMR Spectroscopy. Methodology and Application of Life Science and Materials Science, The NMR Society of Japan. Ed. *Springer*, pp 135-170, (2018), [10.1007/978-981-10-5966-7_9](https://doi.org/10.1007/978-981-10-5966-7_9)
8. N. Matsumori, *M. Murata, “NMR Studies on Natural Product—Stereochemical Determination and Conformational Analysis in Solution and in Membrane”, *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy*, The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan (eds), pp 383-414, *Springer (Singapore)*, 2018, [10.1007/978-981-10-5966-7_14](https://doi.org/10.1007/978-981-10-5966-7_14)
 9. *A. Nakamura, R. Iino, “Visualization of functional structure and kinetic dynamics of cellulases Glycobiophysics”, K.Kato, Y. Yamaguchi, editors, *Springer*, 2018 in press
 10. *T. Katayama, “Initiation of DNA Replication at the Chromosomal Origin of *E. coli*, *oriC*”, *DNA Replication: From Old Principles to New Discovery*, H. Masai and M. Foiani ed. *Springer Nature, Singapore*, 79-98, (2017), [10.1007/978-981-10-6955-0](https://doi.org/10.1007/978-981-10-6955-0)
 11. Y. Yamaguchi, H. Yagi, *K. Kato, “Stable Isotope Labeling of Glycoproteins for NMR Study”, *NMR in Glycoscience and Glycotechnology* , (K.Kato and T.Peters ed.), RSC Publishing (Cambridge), 194-207, (2017), 10.1039/9781782623946-00194
 12. M. Yagi-Utsumi, T. Yamaguchi, Y. Uekusa, *K. Kato, “NMR Characterization of the Conformations, Dynamics, and Interactions of Glycosphingolipids”, *NMR in Glycoscience and Glycotechnology*, (Kato,K. and Peters ed,T.), RSC Publishing (Cambridge), 161-178, (2017), 10.1039/9781782623946-00161
 13. K. Kato, H. Yagi, *Y. Yamaguchi, “NMR Characterization of the Dynamic Conformations of Oligosaccharides”, *Modern Magnetic Resonance, 2nd Edition*, (G.A.Webb ed.), *Springer International Publishing*, in press, (2018), [10.1007/978-3-319-28275-6_35-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-28275-6_35-1)
 14. K. Kato, S. Yanaka, H. Yagi, “Technical basis for nuclear magnetic resonance approach for glycoproteins”, *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy (The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan ed.)*, Springer International Publishing, in press, (2018)
 15. 奥村久士, 「In Silico 創薬」、第4章第1節「高速計算プログラム GEMB による分子動力学シミュレーションの実際」、技術情報協会, 317-327, 2018, ISBN: 978-4-86104-688-9
 16. 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.), (2018), in press
 17. S. Fujiwara, *K. Mizuno, “Role of Intermediate Filaments in Cell Locomotion,” In: *eLS (Encyclopedia of Life Sciences)*, A26365, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, (2017), [10.1002/9780470015902.a0026365](https://doi.org/10.1002/9780470015902.a0026365)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 58

July, 2018

受賞報告

1. 岩田耕一
2018年5月に平成30年度 日本分光学会
学会賞を受賞
<https://www.bunkou.or.jp/prize/h30.html>
2. 杉安和憲
2018年に Friedrich Wilhelm Bessel
Research Award、the Alexander von
Humboldt Foundation (2018) を受賞
3. 鈴木大介
2018年1月26日に平成30年度 公益社
団法人日本化学会 コロイド界面化学部
会 科学研究奨励賞を受賞
https://colloid.csj.jp/awards/h30_en_winner/
4. 矢木真穂
2018年3月25日に平成30年度日本薬学
会奨励賞を受賞
<http://www.pharm.or.jp/prize/award18.shtml>
5. 澤田知久
2018年1月に日本化学会 第67回進歩
賞 (日本化学会)
[http://www.chemistry.or.jp/news/information/
29-7.html](http://www.chemistry.or.jp/news/information/29-7.html)

(今回は平成30年6月までに頂いた情報を掲載しています。前回掲載分もページの追加など新たな情報を頂いたものは掲載しています。)