



## "Dynamical Ordering & Integrated Functions" Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：“外はカリッと中はフワッ” 金属錯体脂質を用いた複合リポソームの形態制御と粘性の解明

#### "The Impact of Metal Complex Lipids on Viscosity and Curvature of Hybrid Liposomes"

Ryo Ohtani\*, Tsukasa Tokita, Tomohisa Takaya, Koichi Iwata\*, Masanao Kinoshita,

Nobuaki Matsumori, Masaaki Nakamura, Leonard F. Lindoy, Shinya Hayami\*

Chem. Comm., 53, 13249-13252, (2017), DOI:10.1039/C7CC07944C

大谷 亮

(熊本大学先端科学研究院

・A02 公募研究代表者)



岩田 耕一

(学習院大学理学部化学科

・A01 公募研究代表者)



松森 信明

(九州大学理学研究院

・A01 公募研究代表者)



両親媒性分子の自己集合体は、疑似的な生体膜としての利用や DDS への応用など生化学から材料化学まで幅広い分野で研究されている。膜の機能化という観点から金属錯体分子を頭部にもつ金属錯体脂質も数多く合成され、酸化還元応答や触媒能有する機能性リポソーム開発が行われてきた。当然、電荷を有する金属錯体は親水性であるため膜表面に存在し機能発現することから、金属錯体脂質から成るリポソームは親水性表面機能に焦点が当てられてきた。しかし、大きな金属錯体分子を頭部に有する脂質は、リン脂質などとは全く異なる構造的特徴を示すことから、アルキル鎖が集積した疎水部の特性にも影響を及ぼすと考えられる。

本論文では、*Dalton Trans.* 2017 で報告した金属錯体脂質  $[\text{Mn}(\text{N})(\text{CN})_4][\text{dabco-C}_{16}\text{H}_{33}]_2$  (**1**) を用いて、DMPC と任意の割合で混合した複合リポソームを合成することで、形態、相転移挙動、アルキル鎖の集積構造、疎水部の粘性について明らかにした。

まず、凍結融解法により DMPC/**1**(x) (x = 0.25, 0.5) を合成し、cryo-TEM 測定を行った。DMPC/**1**(0.25) は球状ベシクルであったのに対し、DMPC/**1**(0.5) は筒状ミセルであった（下図）。この形態の違いは、脂質分子の臨界充填パラメータ (CPP) により説明した。錯体脂質とリン脂質を比較すると、頭部サイズの違いから  $\text{CPP}_1 < \text{CPP}_{\text{DMPC}}$  であると考えられ、錯体脂質の割合を増やすことで膜の曲率が大きくなる。そのため、DMPC/**1**(0.5) においては脂質二重膜が不安定化し、曲率の大きい筒状ミセルへと形態変化したと考えられる。次に、相転移挙動について検討すると、錯体脂質の割合が増えるほど転移温度の上昇が観測された。これは、過去の文献から、膜表面での強い電荷的相互作用によるものであり、すなわち膜表面が“硬い”ことを示唆している。一方で、疎水部に trans-stilbene を導入し、光異性化反応を追跡することで膜の粘性を評価したところ、錯体脂質の割合が増えるに伴い粘性の低下が観測された。以上の結果は、錯体脂質を用いた複合リポソームの“膜表面は硬く膜内部は柔らかい”という特殊な物性を明らかにしただけではなく、これまで膜の曲率の解釈に使われてきた CPP が疎水部の物性にも影響を及ぼしていることを示唆していると考えている。

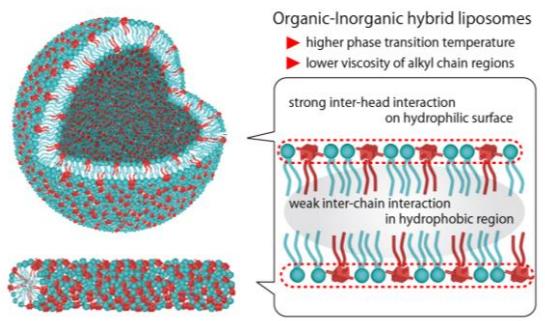


図. 複合リポソームの形態と特性



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：ダイナミックなタンパク質間相互作用

#### "Photoinduced Dimerization of a Photosensory DNA-binding Protein EL222 and its LOV Domain"

Akira Takakado, Yusuke Nakasone, and Masahide Terazima,

*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 24855-24865, (2017), DOI:10.1039/c7cp03686h

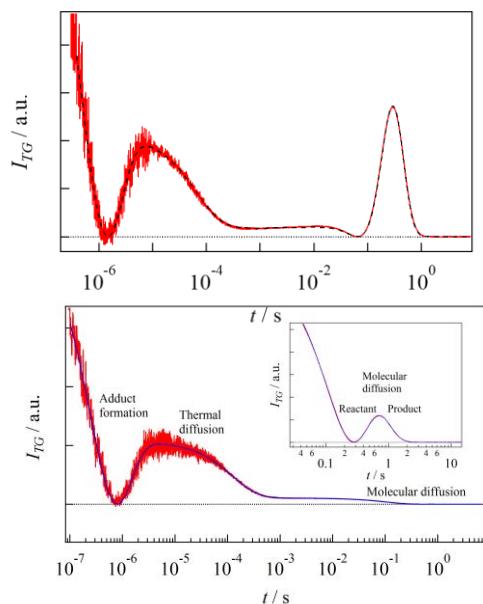
寺嶋正秀  
(京都大学理学研究科・  
A01 計画研究代表者)



タンパク質が生物的な機能を発揮する際には、タンパク質自身の構造変化も重要であるが、それに伴う分子間相互作用変化もさらに重要となる。我々は、こうした分子間相互作用を時間分解で検出することで、タンパク質機能の分子論的理を深めることを目的として研究を進めている。ここでは時間分解拡散係数法を用いて、タンパク質とDNAとの相互作用変化を誘起するタンパク質ダイナミクスを過渡回折格子(TG)法で調べた。ここで用いたEL222というタンパク質は、海洋性バクテリア由来の光受容タンパク質であり、光受容ドメイン(LOV)とDNA結合ドメイン(HTH)からなる。暗状態でモノマー構造を持つEL222は、青色光を照射すると、ダイマー化することで特異的認識配列を含むDNAと結合し、下流配列の転写を促進すると考えられている。本研究では、そのシグナル伝達機構を明らかにするため、光励起されたEL222が構造変化を起こして会合状態を変化させる反応過程を時間分解検出することを目指した。

反応を各部分毎に理解するため、まずHTHドメインを含まないLOVドメインの反応を調べた。これを光励起後に観測されたTG信号を図に示す。最初の減衰と立ち上がりが、発色団の反応であり、その後の100μs程度の減衰が熱拡散による減衰、ミリ秒以降の立ち上がりと減衰がタンパク質拡散による信号である。拡散信号の時間発展を解析することで、数百ミリ秒程度の反応速度で拡散係数の減少を伴う反応が光誘起されることがわかった。濃度依存性の測定から、この反応は光誘起のダイマー化反応であること、また光強度依存性の測定から、このダイマー化は光励起分子と基底状態分子のダイマーであることも明らかとなっ

た。続いてEL222全長タンパク質のTG測定の結果も図に示す。かなり拡散変化を示す信号が弱いことがわかるが、それでも拡大すると拡散係数変化を示す信号があることがわかった。反応物拡散係数は、EL222の暗状態でのモノマーの拡散係数として妥当なものであった。タンパク質濃度を変えて同様の測定をしたところ、拡散係数変化の速度がタンパク質濃度に比例することが分かり、ダイマー化反応が拡散係数減少の要因であることを示している。これはDNAが存在しない状態でEL222を光励起しても何も起こらないと言っていた従来の報告と異なる新しい知見であった。また拡散係数の減少度合いが二分子間の会合では説明できないほど大きいことから、ダイマー化反応に加え、タンパク質の構造変化も光誘起されることがわかった。このタンパク質は、光遺伝学実験でも用いられるタンパク質であり、その基本的な反応過程が明らかとなった。



図：時間分解TG法でとらえたEL222のLOVドメイン(上)と全長EL222(下)の光反応。



# “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

## 業績紹介：構成要素間の相互作用が自己集合過程に及ぼす効果 — アントラセンパネルを持つ $Pd_2L_4$ カプセル錯体の自己集合過程 —

### “Steric Interaction between Neighboring Components Favors the Formation of Large Intermediates in the Self-Assembly Process of a $Pd_2L_4$ Capsule”

Shumpei Kai, Masanori Nakagawa, Tatsuo Kojima, Xin Li, Masahiro Yamashina, Michito Yoshizawa,  
and Shuichi Hiraoka

*Chem. Eur. J.*, in press, DOI:10.1002/chem.201705253

平岡秀一  
(東京大学総合文化研究科  
・A02 計画研究代表者)



我々のグループでは、自己集合過程を明らかにするための新手法(QASAP : Quantitative Analysis of Self-Assembly Process)を開発し、これまでに様々な自己集合性錯体の形成機構を明らかにしてきた。その中で、2座配位子 **2** (図 1)と Pd(II)イオンからなる  $Pd_2L_4$  カゴ型錯体の形成過程では  $Pd_2L_4$ Py\*<sub>2</sub> や  $Pd_2L_4$ Py\*が主な中間体として生成し(Py\*は 3-chloropyridine)、カゴ型構造を形成する最終段階が自己集合過程の律速段階であることを報告した。<sup>[1]</sup>自己集合過程は様々な要因に影響を受けることが最近の我々の研究で明らかになってきたが、今回、構成要素間の分子間相互作用が自己集合過程に及ぼす効果を調べた。本論文の共著者でもある東京工業大学の吉沢らはアントラセンを持つ二座配位子 **1** と Pd(II)イオンから  $Pd_2L_4$  カプセル錯体を形成することを報告しており、**1** は **2** と基本骨格は同じだが、 $Pd_2L_4$  構造を形成した際に、 $Pd_2L_4$  ではアントラセン間が接近しており、配位子間の相互作用があるが、 $Pd_2L_4$  では配位子が離れており、相互作用はない。

$Pd_2L_4$  カプセル錯体の自己集合過程を QASAP により調べると、主に二種類の経路を経て自己集合が進行していることがわかった。1 つはカプセルよりも小さな中間体を経る経路で、もう一方はカプセルよりも大きな中間体を経るもので、後者の経路は  $Pd_2L_4$  錯体では観測されなかった。また、 $Pd_2L_4$  カプセルでは速度論的にトラップされた種が 19% 生成し、 $Pd_2L_4$  錯体に比べ速度論的トラップされた種を生成する傾向が強いこともわかった。このため、 $Pd_2L_4$  カプセルでは、アントラセンパネル間の相互作用により、一部の中間体は大きな種へ成長し、これらの一部がカプセル錯体へ変換し、残りは速度論的にトラップされることが明らかになっ

た。このように、構成要素間の相互作用により自己集合過程自体が変化することが本研究により初めて明らかになった。なお本論文は Hot Paper 及び雑誌の Inside Cover に選ばれました (図 2)。

#### 参考文献

- [1] S. Kai, V. Marti-Centelles, Y. Sakuma, T. Mashiko, T. Kojima, U. Nagashima, M. Tachikawa, P. J. Lusby, S. Hiraoka *Chem. Eur. J.* DOI: 10.1002/chem.201704285.
- [2] N. Kishi, Z. Li, K. Yoza, M. Akita, M. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 11438–11441.

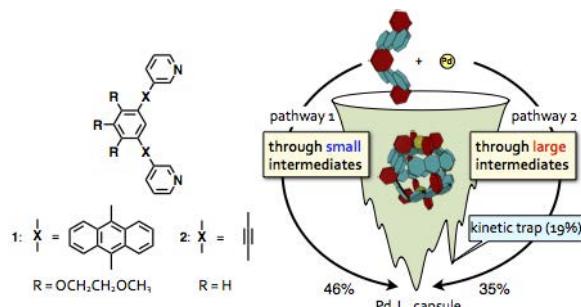


図 1：同一骨格を持つ二座配位子 **1** と **2** の化学構造及びアントラセンパネルからなる二座配位子 **1** と Pd(II)イオンから形成される  $Pd_2L_4$  カプセル錯体の形成機構の模式図

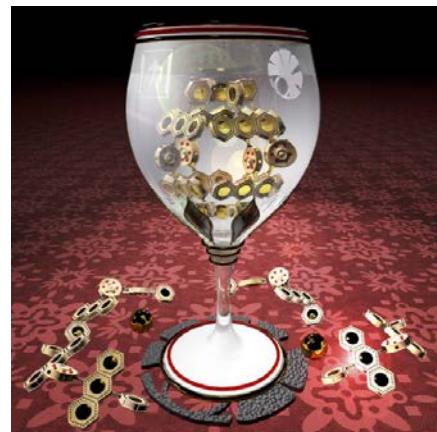


図 2：雑誌の Inside Cover の原画。



# "Dynamical Ordering & Integrated Functions"

## Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：キラルな筒状分子の二重らせんと最強円偏光発光

#### "Chiral Intertwined Spirals and Magnetic Transition Dipole Moments Dictated by Cylinder Helicity"

Sota Sato, Asami Yoshii, Satsuki Takahashi, Seiichi Furumi, Masayuki Takeuchi, and Hiroyuki Isobe

Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 114, 13097-13101, (2017), DOI:10.1073/pnas.1717524114

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科  
・A02 計画研究代表者)



炭素と水素だけからなる、ごく単純な芳香族化合物を環状に連結した分子を使い、精密に構造制御された特異な分子構造に由来する独特な物性の活用例を探索してきている。生命現象においてキラリティは重要であり、不斉炭素という「点」がうみだすキラリティの分子化学は数多く研究されてきているが、単離できる右巻き／左巻きの筒状分子の研究例は限られている。今回、この珍しいキラルな筒状分子、[4]CC（図1）、に着目し、その構造と光学物性にせまった。

単離したP型の[4]CCを結晶化させると、単結晶X線構造解析の結果、M型の二重らせん構造が生じることがわかった（図2左）。M型の[4]CCからはP型の二重らせん構造が生じ、PとM型のラセミ体からは、らせん構造が生じなかった。単分子のらせん構造が、固体への秩序化過程において結晶全体に伝搬することを見いたした。

独特な構造に由来する物性を探る中で、[4]CCは80%もの高い量子収率で青く光り（図2右）、さらに、吸収現象においては、円二色性偏光における大きなコットン効果を示すことを見いたした。理論計算を併用して構造とキラルな光学物性との相関を解明し、剛直で対称性が高い筒状構造が光励起による電子遷移状態において、大きな遷移磁気双極子モーメント（TMDM）を生むことが鍵であるとわかった。この大きなTMDMを活かす光学物性として円偏光発光（CPL）に着目し、測定した。偏光の偏りを示す非対称因子（g値）が0.152にもおよび、有機分子のg値の記録を50年ぶりに1桁更新する成果が得られた。

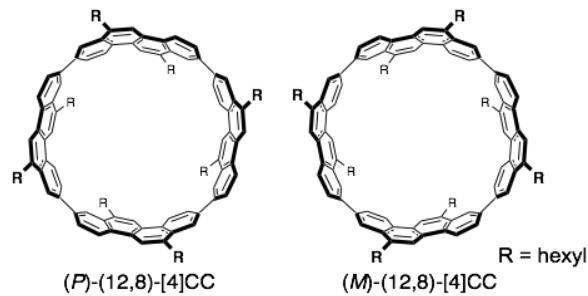


図1：キラルな筒状分子[4]CCの構造。

(P)-(12,8)-[4]CC (M)-(12,8)-[4]CC  $\phi = 80\%$   
M-type double helix P-type double helix  $|g_{\text{lum}}| = 0.152$

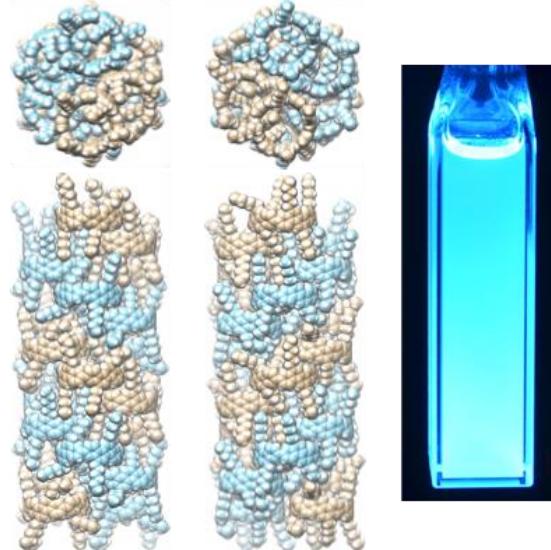


図2：(左) 単結晶X線構造解析により明らかになった[4]CCの二重らせん構造と、(右) 青く明るく円偏光発光する溶液。

本成果は「キラル筒状分子の右手と左手～二重らせん型集積と有機分子での最強円偏光発光～」としてプレスリリースを行い、科学新聞（2017年12月8日）にて報道された。



## "Dynamical Ordering & Integrated Functions" Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：二輪型ベアリング分子の結晶化によるゲスト分子の秩序化

#### "Assembly, Thermodynamics, and Structure of a Two-Wheeled Composite of a Dumbbell-Shaped Molecule and Cylindrical Molecules with Different Edges"

Taisuke Matsuno, Sho Kamata, Sota Sato, Atsutoshi Yokoyama, Parantap Sarkar, and Hiroyuki Isobe

*Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 15020-15024, (2017), DOI:10.1002/anie.201709442

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科  
・A02 計画研究代表者)



複数の分子を秩序化してあらたな構造をつくり、その独特な構造に由来する特異な性質の発現を探索している。これまで、溶液中で秩序化形成して超分子をうみだす検討が多かったが、今回、さらに結晶性固体へと秩序化し、ゲスト分子を精緻に集積する検討を行った。ホスト分子の精密設計により、ゲストを自在に整列させることができ、特異な性質を示す材料への転換法を見いだした。

広い $\pi$ 共役系をもつ芳香族分子、アンタントレンを環状に4分子だけ連結することで筒状分子[4]cyclo-2,8-anthranthrenylene ([4]CA)の合成を報告した。この筒状分子は $C_{60}$ フラーレンを内部に閉じ込めて超分子形成することがわかっている。今回、二量化した $C_{120}$ を用いたところ、 $C_{120}$ を1分子の[4]CAが包み込んだ中間体を経て、段階的に二輪型ベアリング超分子を構築できることがわかった(図1)。

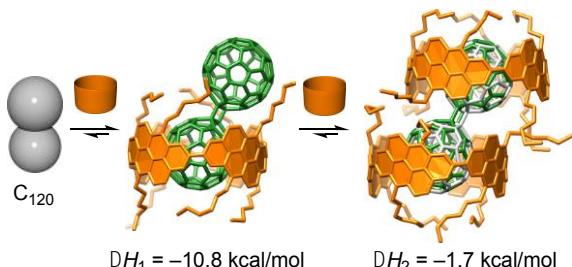


図1：溶液中の段階的な二輪型ベアリングの秩序化。エンタルピーをITCを用いて決定した。

中間体および二輪型ベアリングの結晶化を検討したところ、蒸気拡散法により単結晶を得ることができた(図2)。炭素と水素だけからなる超分子であるために、

方向性をもたない弱いファンデルワールス力による分子間接触で形成されているが、整然とした秩序構造をうみだすことができた。特に、中間体においては、ゲスト分子である $C_{120}$ 同士に相互作用が生じ、1次鎖を形成して整列することを見いだした(図3)。超分子中ではフラーレンが動的に回転することがわかってきており、秩序化された結晶固体中の挙動に興味をもつて研究を進めている。

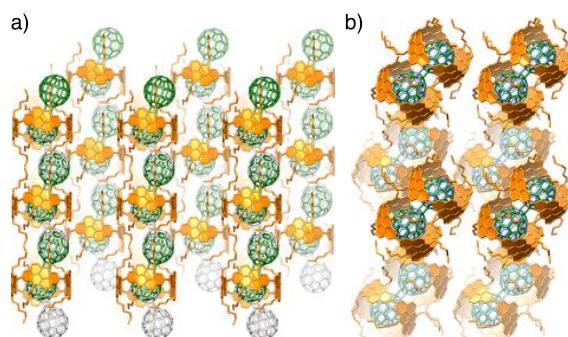


図2. 超分子の結晶化による固体中の秩序形成。a) 中間体およびb)二輪型ベアリングの充填構造は、放射光X線を用いた単結晶構造解析により明らかにした。(SPring-8, BL38B1)

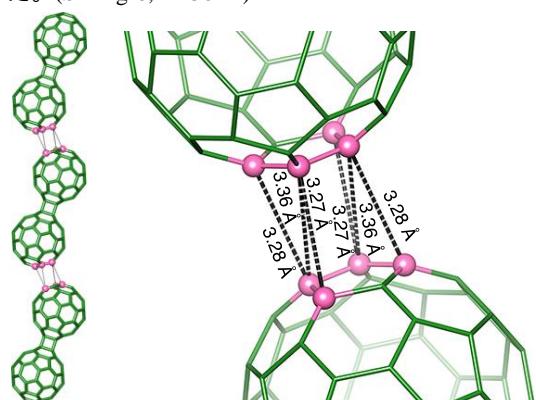


図3. 中間体の結晶固体中の $C_{120}$ フラーレン間のファンデルワールス相互作用。



## "Dynamical Ordering & Integrated Functions" Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：湾曲した $\pi$ 系をもつらせん分子の自発的秩序化

#### "Enhanced Yet Inverted Effects of $\pi$ -extension in Self-assembly of Curved $\pi$ -systems with Helicity"

Taisuke Matsuno, Kanako Kogashi, Sota Sato, and Hiroyuki Isobe

Org. Lett., 19, 6456–6459, (2017), DOI:10.1021/acs.orglett.7b03534

佐藤宗太

(東京大学理学系研究科  
・A02 計画研究代表者)



空孔を有する大環状芳香族分子の合成と特異な秩序化発現を探求してきており、平面状のグラフェンの部分構造や筒状のカーボンナノチューブの部分構造となる分子をうみだしてきた。今回、1分子内に4カ所のヘリセン型のらせん構造と2カ所のビアリール構造をもち、それぞれがP/M, R/Sのキラリティの源となる分子を合成した。この環状のキラルな分子がエントロピーを駆動力として、溶液中で自発的に秩序化することを見いだした（図1）。

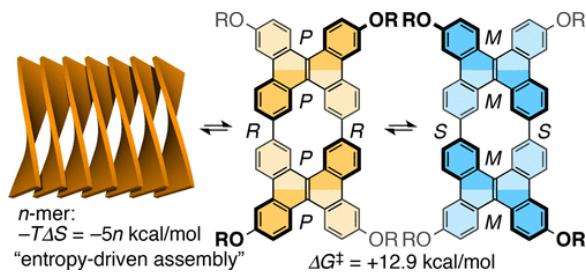


図1：キラリティの反転とエントロピー駆動による溶液中の秩序化が生じる湾曲  $\pi$  系をもつ分子。

分子の動きは、重塩化メチレン溶液に対して、温度と濃度を変えた128種類の<sup>1</sup>H NMRスペクトルを測定して追跡した。図2に例示するように、1セットのピークのみが観測され、それらの化学シフト値は濃度変化に伴って徐々に変化したことから、NMRのタイムスケールよりも速い平衡で会合体が生じていることがわかった。この会合は、同じ形式の相互作用が繰り返すことによって1次元集積された超分子へと秩序化すると考えられ、そのようなアイソデスマックモデル

(isodesmic mode)により解析したところ、会合定数は  $K_a = 2,200 \text{ M}^{-1}$  (298 K)であることがわかった。5種類の温度で計測し、会合定数と温度を用いてファントホップ解析を行うことで、会合エンタルピーは  $\Delta H = +0.66 \text{ kcal/mol}$ 、会合エントロピーは  $\Delta S = +17.7 \text{ cal/(mol}\cdot\text{K)}$  と決定できた。298 Kにおける会合エネルギーは  $\Delta G = -4.61 \text{ kcal/mol}$  (298 K)であり、エントロピー項  $-T\Delta S = -5.27 \text{ kcal/mol}$  が支配的であることがわかった。類似のより小さな分子の場合 (*Angew. Chem., Int. Ed.* 2011, 50, 6048) と比較して、このような広い  $\pi$  電子系がスタッツする場合には、エントロピー駆動型の秩序化が溶液中で進行することを見いだした。

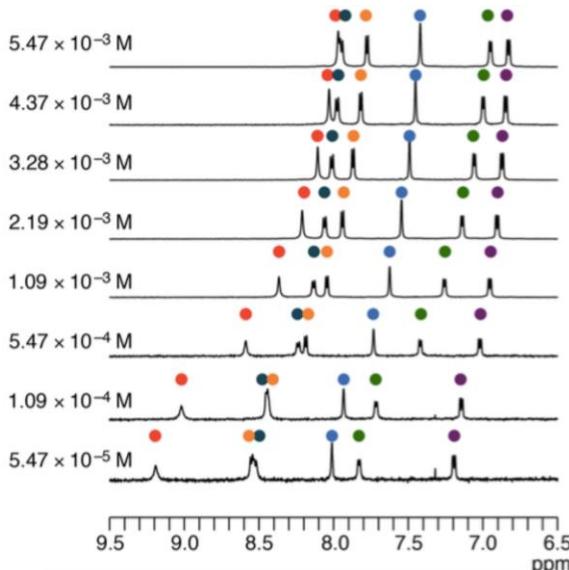


図2：298 Kにおける濃度変化に伴う<sup>1</sup>H NMRスペクトルの変化。



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 業績紹介：アミロイド線維前駆中間体が線維形成に果たす役割を解明 -インスリン由来モデルペプチドを用いた実験的研究-

#### "A Specific Form of Prefibrillar Aggregates that Functions as a Precursor of Amyloid Nucleation"

Naoki Yamamoto, Shoko Tsuhara, Atsuo Tamura, and Eri Chatani

*Sci. Rep.*, in press, (2017), DOI:10.1038/s41598-017-18390-y

山本直樹

(神戸大学理学研究科化学専攻・A03 公募研究連携研究者)



茶谷絵理

(神戸大学理学研究科化学専攻・A03 公募研究代表者)

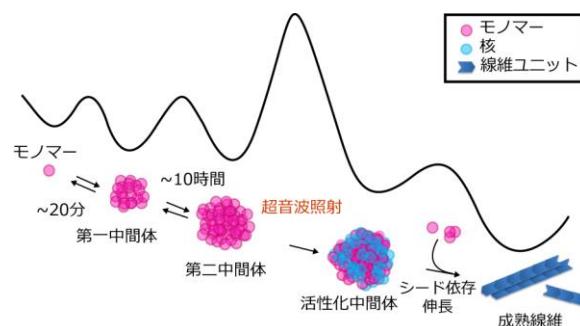


アミロイド線維は $\beta$ シートが積層した線維状のナノ構造体であり、アルツハイマー病など様々な疾患の原因物質と考えられている。アミロイド線維形成過程は、線維伸長に必要な核を形成するための核形成相とそれに続く線維伸長相に大別され、一旦核が形成されると線維形成はすみやかに進行する。このように核形成は線維形成を決定付けるための重要なステップであるが、一般的には核形成の最中に経由する中間体は熱力学的、速度論的に不安定であると考えられている。その場合、中間体の直接的な観察が難しいため、核形成プロセスについての構造的な知見を得ることは容易でない。

しかしながら近年、アミロイド線維形成の初期に見られるオリゴマー様の集合体が核形成反応の中間体として直接寄与する例がいくつか明らかにされている。我々もこれまでに、ウシ臍臓由来のインスリンのアミロイド線維形成初期において、オリゴマー様の線維前駆中間体が一旦大量蓄積したのち線維化する反応経路を見つけた。本研究では、これに続きアミノ酸30残基から成るヒトインスリンB鎖を用いて、チオフラビンT蛍光アッセイ、円偏光二色性分光、動的光散乱、原子間力顕微鏡等の手法により核になる以前の中間体の捕捉および観察を行った。B鎖は30残基よりなる比較的疎水性の高いポリペプチドであり、アミロイド線維

を形成する。B鎖をpH8.7に調整し室温、振とう条件下で観察すると、約2時間で粒状の集合体を形成しその後速やかにアミロイド線維を形成した。さらに静置条件下で粒状集合体を準安定状態として一旦蓄積させたうえで超音波を照射すると、その直後より線維形成が確認された。粒状集合体が生成する前に超音波を照射しても有意な線維形成は確認されなかったことより、この集合体はアミロイド線維核を形成する能力を持つ線維前駆中間体であるという結論に至り、下図のようなスキームが提案された。

今回、中間体としてはサイズおよび二次構造組成の異なる2種類が確認されたが、興味深いことに超音波に応答し線維核を生成したのは、第二中間体のみであった。このことより、核形成の中間体として機能するには単にポリペプチド鎖が高密度に集合するだけでは不十分であり、パッキングの状態などに重要な特性を持つ可能性が示唆された。



図：本研究より提案された前駆核中間体を経た線維形成のスキーム。第一中間体を経て超音波応答性の第二中間体が生成する。超音波照射直後よりシード依存的伸長に類似したアミロイド線維伸長が観測される。



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 台湾国立交通大 DAC セミナー Dynamical Ordering and Integrated Functions of Biomolecular Systems 報告

内山進

(大阪大学工学研究科  
・A03 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  
分子科学研究所・A02 公募研究  
代表者)



本領域のアドバイザーである増原宏先生にご招待頂き、本領域の支援のもと、2017年11月24日に台湾の国立交通大学理学院応用化学系で行われた DAC ( Department of Applied Chemistry ) セミナー 「Dynamical Ordering and Integrated Functions of Biomolecular Systems」で講演をさせて頂きました。本セミナーには、応用化学系の大学院生と教員の皆さんに多数ご参加頂きました（写真1）。

内山は、「Biophysical characterizations of biopharmaceuticals」というタイトルで、タンパク質溶液物性を解析する最新手法を用いた基礎研究と応用展開についての講演を行いました。飯野は、「High-speed single-molecule imaging analysis of protein molecular motors probed by gold nanoparticles and nanorods」というタイトルで、生体分子モーターの1分子計測および新しい分子モーターを創る取り組みについて講演を行いました。それぞれ90分の持ち時間を頂き、存分に講演させて頂きました。

セミナー当日と前日には、応用化学系の教員の方々にラボツアーをして頂きました。どのラボも実用を見据えた非常にレベルの高い研究を開発しており、大いに刺激を受けました。また、増原先生が取り組んでいる最新の研究を紹介頂き、ラボ見学もさせて頂きました（写真2）。光ピンセットによる金ナノ粒子・ポリ

スチレンビーズの空間的パターン形成やキラル選択的結晶化等、オリジナルのアイデアでゼロから生み出された成果に感動されました。

セミナー後は、増原先生行きつけのお店で客家料理を堪能させて頂きました。研究だけでなく文化や政治に至るまで幅広く議論させて頂きました。今回の台湾訪問は、我々の研究のグローバル化について考えるとても良い機会になりました。最後に、増原先生のHPに掲載されているメッセージで締めさせて頂きます。

「自分の能力をどこで生かすか、どこで一番必要とされるか、そしてどこで生きていくかをグローバルに考えていただければと思う。」

[http://www.masuhara.jp/message/2015/1\\_koubunshi.html](http://www.masuhara.jp/message/2015/1_koubunshi.html)



写真1. セミナーの様子



写真2. 増原先生の研究室を見学



写真3. 増原先生行きつけの客家料理店にて



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### “Experimental Approaches of NMR Spectroscopy”を執筆して

内藤 晶

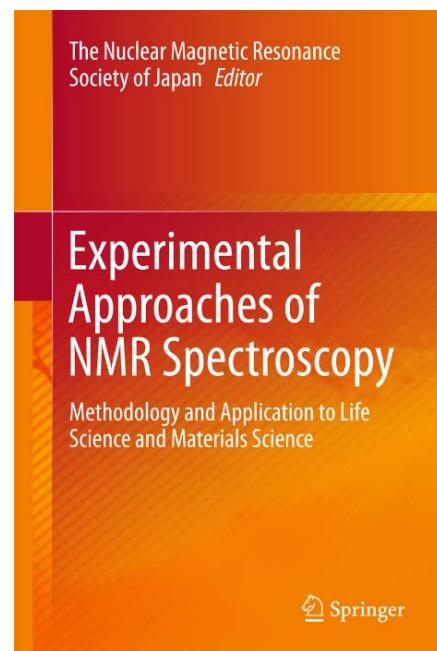
(横浜国立大学工学研究院・  
A01 公募研究代表者)



Experimental approaches of NMR spectroscopy  
-Methodology and application to life science and materials  
science-  
The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan Editor  
Springer: ISBN 978-981-10-5965-0

日本 NMR 学会では表記タイトルの NMR の実験法に焦点を絞った NMR 書籍の出版を企画し、NMR 学会に NMR 書籍編集委員会（内藤 晶：編集委員長、朝倉 哲朗、嶋田一夫、竹腰清乃理、山本泰彦）を設立して NMR 書籍の編集を行ってきました。このほど、この NMR 実験書籍が Springer 社より 2017 年 11 月 25 日に e-book 版が出版されました。

本書では、現在 NMR 関連分野で活躍されている研究者に実験手法を中心とした研究の総説を執筆していただきました。Part I (Chapter 1–9) では、特に方法論の研究を中心に、高圧 NMR 法、同位体標識 NMR 法、NMR データ解析法、DNP-NMR 法、超高速 MAS 回転 NMR 法、光およびマイクロ波照射 NMR 法、緩和分散 NMR 法、常磁性プローブ NMR 法、固体 NMR による膜結合生体分子の構造解析法について、実験法の詳細が述べられています。Part II (Chapter 10–22) では、シリク材料の NMR、高分子材料の NMR、機能性材料の重水素 NMR、天然物の NMR、糖タンパク質の NMR、RNA の NMR、メタボリック NMR、常磁性物質の NMR、有機四極子核の NMR、無機四極子核の NMR、NMR によるタンパク質—リガンド相互作用の解析法、残余異方相互作用を利用したタンパク質の立体構造と動的構造の決定法について、NMR の応用研究を中心に述べられています。



本領域研究班員からは次の Chapter について執筆していただいています。

Chapter 3: Advances in NMR data acquisition and processing for protein structure determination.

Teppei Ikeya (A01 班員)、Yutaka Ito

Chapter: 5 Photoirradiation and microwave irradiation NMR spectroscopy. Akira Naito (A01 班員)、Yoshiteru Makino, Yugo Tasei, Izuru Kawamura

Chapter 9: Structure determination of membrane peptides and proteins by solid-state NMR. Izuru Kawamura, Kazushi Norisada, Akira Naito (A01 班員)

Chapter 14: NMR studies on natural product – Stereochemical determination and conformation analysis in solution and in membrane.

Nobuaki Matsumori (A01 班員)、Michio Murata

Chapter 15: Technical basis for nuclear magnetic resonance approach for glycoproteins. Koichi Kato (領域代表者)、Saeko Yanaka, Hirokazu Yagi

詳しくは本書籍についての出版社ホームページも併せてご覧ください。

<http://www.springer.com/jp/book/9789811059650>



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 佐藤宗太班員の研究成果が新聞に掲載される

A02 計画研究代表者の佐藤宗太班員の研究成果が科学新聞（2017年12月8日）に掲載されました。

The Science News 學 月刊 2017年(平成29年)12月8日(金曜日) 第3658号

**■非対称要素 (R型)**  
異方性因子とも呼ばれる円偏光の吸収・発光において、右あるいは左どちらかの偏光に偏つて、その度合いを示す値。その最大値が1である。

**■非対称要素 (S型)**  
異方性因子とも呼ばれる円偏光の吸収・発光において、右あるいは左どちらかの偏光に偏つて、その度合いを示す値。それは見らるが、炭素と水素のみからできている分子(炭化水素)では見つか

東京大学理学研究科の磯部真之教授、佐藤宗太特任准教授らの共同研究  
研究グループは、まず、単純分子が二重らせん階段状構造に組み上がるを見た。そして、二重らせんが形づくられる際、両端の左巻き・右巻きを決定していることを見つけた。その後、二重らせんのキラリティ(右手性と左手性)が、らせん階段の左巻き・右巻きを決定する成功した。研究グループは、また、炭素と水素からなる簡状分子のキラリティが、その分子の集積構造や光学性という興味深い特徴を決定づけることを明らかにすることに成功した。

この成果により今後、キラリティ・二重らせんを炭素と水素からなる単純な炭化水素分子で制御できるという発見は、これからキラリティ空間制御法の開発においても重要な知見です。\*

この結果は、炭化水素筒状分子特徴 キラリティが決定づけ

新聞の無断コピーは原則違法です。



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

### 最近の動き

#### 雑誌論文

1. Y. Matsumura, S. Hiraoka, and \*H. Sato, “A Reaction Model on the Self-assembly Process of Octahedron-shaped Coordination Capsules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 20338-20342, (2017), [DOI: 10.1039/c7cp03493h](https://doi.org/10.1039/c7cp03493h) (2017 PCCP HOT Articles に選出)
2. \*T. Fujita, Y. Haketa, H. Maeda, T. Yamamoto, “Relating Stacking Structures and Charge Transport in Crystal Polymorphs of the Pyrrole-Based pi-Conjugate Molecule”, *Org Electron.*, **49**, 53, (2017), [DOI: 10.1016/j.orgel.2017.06.028](https://doi.org/10.1016/j.orgel.2017.06.028)
3. T. Fujita, \*T. Yamamoto, “Assessing the Accuracy of Integral Equation Theories for Nano-sized Hydrophobic Solutes in Water”, *J. Chem. Phys.*, **147**, 014110, (2017), [DOI: 10.1063/1.4990502](https://doi.org/10.1063/1.4990502)
4. H. Arefi, \*T. Yamamoto, “Self-assembly of a Model Supramolecular Polymer Studied by Replica Exchange with Solute Tempering”, *J. Chem. Phys.* ,(Commun), in press, (2017)
5. A. Takakado, Y. Nakasone, K. Okajima, S. Tokutomi, \*M. Terazima, “Light-Induced Conformational Changes of the LOV2-Kinase and the Linker Region in Arabidopsis Phototropin2”, *J. Phys. Chem. B*, **121**, 4414-4421, (2017), [DOI: 10.1021/acs.jpcb.7b01552](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.7b01552)
6. S. Nozue, M. Katayama, M. Terazima, \*S. Kumazaki, “Comparative Study of Thylakoid Membranes in Terminal Heterocysts and Vegetative Cells from Two Cyanobacteria, Rivularia M-261 and Anabaena Variabilis, by Fluorescence and Absorption Spectral Microscopy”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA)*, **1858**, 742-749, (2017), [DOI: 10.1016/j.bbabi.2017.05.007](https://doi.org/10.1016/j.bbabi.2017.05.007)
7. A. Takakado, Y. Nakasone, \*M. Terazima, “Photoinduced Dimerization of a Photosensory DNA-binding Protein EL222 and its LOV Domain”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 24855-24865, (2017), [DOI: 10.1039/c7cp03686h](https://doi.org/10.1039/c7cp03686h)
8. M. Kondoh, \*M. Terazima, “Conformational and Intermolecular Interaction Dynamics of Photolyase/Cryptochrome Proteins Monitored by the Time-resolved Diffusion Technique”, *Photochem. Photobiol.*, **93**, 15–25, (2017), [DOI: 10.1111/php.12681](https://doi.org/10.1111/php.12681)
9. R. Kawatani, Y. Nishiyama, H. Kamikubo, K. Kakiuchi, H. Ajiro, “Aggregation Control by Multi-stimuli-Responsive Poly (N-vinylamide) Derivatives in Aqueous System”, *Nanoscale Res. Lett.*, **12**, 461, (2017), [DOI: 10.1186/s11671-017-2221-7](https://doi.org/10.1186/s11671-017-2221-7)
10. M. Nawata, H. Tsutsumi, Y Kobayashi, S. Unzai, S. Mine, T. Nakamura, K. Uegaki, H. Kamikubo, M. Kataoka, \*D. Hamada, “Heat-induced Native Dimerization Prevents Amyloid Formation by Variable Domain from Immunoglobulin Light-chain REI”, *FEBS J.*, **284**(18), 3114-3127, (2017), [DOI: 10.1111/febs.14181](https://doi.org/10.1111/febs.14181)
11. K. Yonezawa, N. Shimizu, K. Kurihara, Y. Yamazaki, \*H. Kamikubo, M. Kataoka, “Neutron Crystallography of Photoactive Yellow Protein Reveals Unusual Protonation



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- State of Arg52 in the Crystal”, *Sci. Rep.*, **7**, 9361, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-09718-9](https://doi.org/10.1038/s41598-017-09718-9)
- (2017), [DOI: 10.1103/PhysRevE.96.040601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.040601)
12. 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. Reps.*, **7**, 12142, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-12283-w](https://doi.org/10.1038/s41598-017-12283-w)
13. P. Bernadó, N. Shimizu, G. Zaccai, \*H. Kamikubo, \*M. Sugiyama, “Solution Scattering Approaches to Dynamical Ordering in Biomolecular Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 253-274, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.015](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.10.015)
14. 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.*, in press, (2017),  
[DOI: 10.1007/s12551-017-0334-y](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0334-y)
15. \*A. Chiba, M. Inui, Y. Kajihara, K. Fuchizaki, R. Akiyama, “Isotactic Poly(4-methyl-1-pentene) Melt as a Porous Liquid: Reduction of Compressibility due to Penetration of Pressure Medium”, *J. Chem. Phys.*, **146**, 194503-1-5, (2017),  
[DOI: 10.1063/1.4983508](https://doi.org/10.1063/1.4983508)
16. \*M. Hishida, Y. Nomura, R.Akiyama, Y. Yamamura, \*K. Saito, “Electrostatic Double-layer Interaction between Stacked Charged Bilayers” *Phys. Rev. E*, **96**, 040601(R),
- (2017), [DOI: 10.1103/PhysRevE.96.040601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.040601)
17. \*H. Okumura, M. Higashi, Y. Yoshida, H. Sato, R.Akiyama, “Theoretical Approaches for Dynamical Ordering of Biomolecular Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 212-228, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.001](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.10.001)
18. \*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)
19. \*T. Ikeya, D. Ban, D. Lee, Y. Ito, K. Kato, \*C. Griesinger, “Solution NMR Views of Dynamical Ordering of Biomacromolecules”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 287-306, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.08.020](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.08.020)
20. \*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.*, in press,  
[DOI:10.1016/j.bbagen.2017.11.003](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.11.003)
21. \*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.*, in press.,  
[DOI:10.1039/C7CP06343A](https://doi.org/10.1039/C7CP06343A)
22. F. Lu, N. Kitamura, T. Takaya, K. Iwata, \*T.



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Nakanishi, Y. Kurashige, “Experimental and Theoretical Investigation of Fluorescence Solvatochromism of Dialkoxyphenyl-pyrene Molecules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press, [DOI:10.1039/C7CP06811E](https://doi.org/10.1039/C7CP06811E)
23. \*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 Photochemical Reaction in Hydrophobic Fields”, *Chem. Comm.*, in press, [DOI:10.1039/C7CC07944C](https://doi.org/10.1039/C7CC07944C)
24. 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.*, in press, [DOI:10.1039/C7CP05584F](https://doi.org/10.1039/C7CP05584F)  
(2017 PCCP HOT Article)
25. N. Dwivedi, A. Verma, T. Takaya, K. Iwata, \*S. Saha, \*S. S. Sunkari, “NIR Luminescent Heterodinuclear [ZnII LnIII] Complexes: Synthesis, Crystal Structures and Photophysical Properties”, *J. Luminesc.*, **192**, 156-165, (2017), [DOI:10.1016/j.jlumin.2017.06.045](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2017.06.045)
26. F. Lu, \*T. Takaya, K. Iwata, I. Kawamura, A. Saeki, M. Ishii, K. Nagura, \*T. Nakanishi, “A Guide to Design Functional Molecular Liquids with Tailorable Properties using Pyrene-Fluorescence as a Probe”, *Sci. Rep.* **7**, 3416 (2017), [DOI:10.1038/s41598-017-03584-1](https://doi.org/10.1038/s41598-017-03584-1)
27. T. Kozai, T. Sekiguchi, T. Satoh, H. Yagi, \*K. Kato, \*T. Uchihashi, “Two-step Process for Disassembly Mechanism of Proteasome  $\alpha$ 7 Homo-tetradecamer by  $\alpha$ 6 Revealed by High-speed Atomic Force Microscopy”, *Sci. Rep.* **7**, 15373, (2017), [DOI: 10.1038/s41598-017-15708-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-15708-8)
28. 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.*, in press, [DOI: 10.1039/c7cp04606e](https://doi.org/10.1039/c7cp04606e)
29. N. Terahara, N. Kodera, T. Uchihashi, T. Ando, \*K. Namba, \*T. Minamino, “Na<sup>+</sup>-induced Structural Transition of MotPS for Stator Assembly of Bacillus Flagellar Motor”, *Sci. Adv.*, **3**, eaao4119, (2017), [DOI: 10.1126/sciadv.aao4119](https://doi.org/10.1126/sciadv.aao4119)
30. \*M. Shibata, H. Watanabe, T. Uchihashi, T. Ando, R. Yasuda, “High-speed Atomic Force Microscopy Imaging of Live Mammalian Cells”, *BPPB*, **14**, 127-135, (2017), [DOI: 10.2142/biophysico.14.0\\_127](https://doi.org/10.2142/biophysico.14.0_127)
31. \*M. Shibata, \*H. Nishimasu, N. Kodera, S. Hirano, T. Ando, T. Uchihashi, \*O. Nureki, “Real-space and Real-Time Dynamics of CRISPR-Cas9 Visualized by High-speed Atomic Force Microscopy”, *Nat. Commun.*, **8**, 1430, (2017), [DOI:10.1038/s41467-017-01466-8](https://doi.org/10.1038/s41467-017-01466-8)
32. \*T. Satoh, C. Song, T. Zhu, T. Toshimori, K. Murata, Y. Hayashi, H. Kamikubo, T. Uchihashi, \*K. Kato, “Visualisation of a



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Flexible Modular Structure of the ER Folding-sensor Enzyme UGGT”, *Sci. Rep.*, **7**, 12142, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-12283-w](https://doi.org/10.1038/s41598-017-12283-w)
- Nuclear Pore Resilience as a Dying Code in Colorectal Cancer Cells”, *ACS Nano*, **11**, 5567-5578, (2017),  
[DOI: 10.1021/acsnano.7b00906](https://doi.org/10.1021/acsnano.7b00906)
33. \*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.*, in press,  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.07.010](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.07.010)
34. H. Harada, \*A. Onoda, \*T. Uchihashi, H. Watanabe, N. Sunagawa, M. Samejima, \*K. Igarashi, T. Hayashi, “Interdomain Flip-flop Motion Visualized in Flavocytochrome Cellobiose Dehydrogenase Using High-speed Atomic Force Microscopy during Catalysis”, *Chem. Sci.*, **8**, 6561-6565, (2017),  
[DOI: 10.1039/c7sc01672g](https://doi.org/10.1039/c7sc01672g)
35. S. Matsui, T. Kureha, S. Hiroshige, M. Shibata, \*T. Uchihashi, \*D. Suzuki, “Fast Adsorption of Soft Hydrogel Microspheres on Solid Surfaces in Aqueous Solution”, *Angew. Chem. Int. Ed. (Communication)* **56**, 12146-12149, (2017), [DOI: 10.1002/anie.201705808](https://doi.org/10.1002/anie.201705808)
36. J. J. Keya, D. Inoue, Y. Suzuki, T. Kozai, D. Ishikuro, N. Kodera, T. Uchihashi, A. Md. R. Kabir, M. Endo, K. Sada, A. Kakugo, “High-Resolution Imaging of a Single Gliding Protofilament of Tubulins by HS-AFM”, *Sci. Rep.*, **7**, 6166, (2017), [DOI:10.1038/s41598-017-06249-1](https://doi.org/10.1038/s41598-017-06249-1)
38. D. Aoki, G. Aibara, S. Uchida, \*T. Takata, “A Rational Entry to Cyclic Polymers via Selective Cyclization by Self-Assembly and Topology Transformation of Linear Polymers” *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 6791–6794, (2017),  
[DOI: 10.1021/jacs.7b01151](https://doi.org/10.1021/jacs.7b01151)  
(ACS Editor’s Choice に選出)
39. J. Sawada, D. Aoki, \*T. Takata, “Vinylic Rotaxane Cross-Linker Comprising Different Axle Length for the Characterization of Rotaxane Cross-linked Polymers” *Macromol. Symposia*, **372**, 115–119, (2017),  
[DOI: 10.1002/masy.201600160](https://doi.org/10.1002/masy.201600160)
40. D. Aoki, \*T. Takata, “Mechanically linked supramolecular polymer architectures derived from macromolecular [2]rotaxanes: Synthesis and topology transformation” *Polymer*, **128**, 276–296, (2017),  
[DOI: 110.1016/j.polymer.2017.08.020](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.08.020)
41. 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., Int. Ed.*, **56**, 15393–15396, (2017),  
[DOI: 10.1002/anie.201709633](https://doi.org/10.1002/anie.201709633)  
(VIP に選出)
42. S. Hiroshige, T. Kureha, D. Aoki, J. Sawada, D. Aoki, \*T. Takata, \*D. Suzuki, “Formation of Tough Films by Evaporation of Water from Dispersions of Elastomer Microspheres Crosslinked with Rotaxane Supramolecules”



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Chem. Eur. J.*, **23**, 8405–8408, (2017),  
[DOI: 10.1002/chem.201702077](https://doi.org/10.1002/chem.201702077)
- Chem. Phys. Lett.*, **674**, 168-172, (2017),  
[DOI:10.1016/j.cplett.2017.02.073](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.02.073)  
(Select as Editor's choice),
43. 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  $\text{Pd}_2\text{L}_4$  Cage Consisting of Rigid Ditopic Ligands”, *Chem. Eur. J.*, in press, (2017), [DOI: 10.1002/chem.201704285](https://doi.org/10.1002/chem.201704285)
44. 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.*, in press, (2017), [DOI:10.1039/C6CP07754D](https://doi.org/10.1039/C6CP07754D)
45. \*N. Kungwan, C. Ngaojampa, Y. Ogata, T. Kawatsu, Y. Oba, Y. Kawashima, \*M. Tachikawa, “Solvent Dependence of Double Proton Transfer in the Formic Acid Formamidine Complex: Path Integral Molecular Dynamics Investigation”, *J. Phys. Chem. A*, in press, (2017), [DOI: 10.1021/acs.jpca.7b07010](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b07010)
46. \*T. Takayanagi, K. Suzuki, T. Yoshida, Y. Kita, M. Tachikawa, “Quantum dynamics study on the binding of a positron to vibrationally excited states of hydrogen cyanide molecule”, *Chem. Phys. Lett.*, **675**, 118-123, (2017), [DOI:10.1016/j.cplett.2017.03.025](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.03.025)
47. K. Yamamoto, Y. Kanematsu, U. Nagashima, A. Ueda, H. Mori, \*M. Tachikawa, “Multicomponent DFT study of geometrical H/D isotope effect on hydrogen-bonded organic conductor,  $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat EDT-ST})_2$ ”,
48. K Kamgar-Parsi, J. Tolchard, B. Habenstein, A. Loquest, A. Naito, \*A. Ramamoorthy “Structural Biology of Calcitonin: from Aqueous Therapeutic Properties to Amyloid Aggregation,” *Isr. J. Chem.*, **57**, 634-650, (2016), [DOI:10.1002/ijch.201600096](https://doi.org/10.1002/ijch.201600096)
49. \*T. Asakura, K. Miyazawa, Y. Tasei, S. Kametani, Y. Nakazawa, A. Aoki, A. Naito. “Packing arrangement of  $^{13}\text{C}$  selectively labeled sequence model peptides of sania Cynthia ricini silk fibroin fiber studied by solid-state NMR”. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 13379-13386, (2017), [DOI:10.1059/c7cp01199g](https://doi.org/10.1059/c7cp01199g)
50. \*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)*, in press, (2017), [DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.06.004](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.06.004)
51. \*T. Asakura, A. Nishimura, S. Kametani, S. Kawanishi, A. Aoki, F. Suzuki, H. Kaji, A. Naito, “Refined Crystal Structure of Samia Cynthia Silk Fibroin Revealed by Solid-state NMR Investigations”. *Biomacromolecules*, **18**, 1965-1974, (2017), [DOI: 10.1021/acs.biomac.7b00441](https://doi.org/10.1021/acs.biomac.7b00441)
52. A. Naito, Y. Tasei, A. Nishimura, \*T. Asakura. “Packing Arrangements and Intersheet Interaction of Alanine Oligopeptides as Revealed by Relaxation Parameters Obtained



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- from High-resolution  $^{13}\text{C}$  solid-state NMR”, *J. Phys. Chem. B*, **121**(38), 8946-8955, (2017),  
[DOI: 10.1021/acs.jpcb.7b07068](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.7b07068)
53. K. Kamgar-Parsi, L. Hong, A. Naito, C.L. Brooks III, \*A. Ramamoorthy. “Growth-incompetent Monomers of Human Calcitonin Lead to a Noncanonical Direct Relationship between Peptide Concentration and Aggregation Lag Time”. *J. Biol. Chem.*, **292**, 14963-14976, (2017),  
[DOI: 10.1074/jbc.M117.791236](https://doi.org/10.1074/jbc.M117.791236)
54. A. Agena, S. Iuchi, \*M. Higashi, “Theoretical Study on Photoexcitation Dynamics of a Bis-diimine Cu(I) Complex in Solutions,” *Chem. Phys. Lett.*, **679**, 60-65, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.cplett.2017.04.082](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.04.082)  
(カバーイラストトレーシヨンに採用)
55. \*S. Arimitsu, T. Yonamine, \*M. Higashi, “Cinchona-Based Primary Amine Catalyzed a Proximal Functionalization of Dienamines: Asymmetric  $\alpha$ -Fluorination of  $\alpha$ -Branched Enals”, *ACS Catal.*, **7**, 4736, (2017),  
[DOI: 10.1021/acscatal.7b01178](https://doi.org/10.1021/acscatal.7b01178)
56. P. Ahmadi, M. Higashi, N. J. de Voogd, \*Junichi Tanaka, “Two Furanoesterterpenoids from the Sponge *Luffariella variabilis*”, *Mar. Drugs.*, **15**, 249, (2017), [DOI: 10.3390/md15080249](https://doi.org/10.3390/md15080249)
57. \*H. Okumura, M. Higashi, Y. Yoshida, H. Sato, R. Akiyama, “Theoretical Approaches for Dynamical Ordering of Biomolecular Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA)*, **1862**, 212-228, (2018),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.001](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.10.001)
58. D. Murata, H. Okano, C. Angkawidjaja, M. Akutsu, S-i. Tanaka, K. Kitahara, T. Yoshizawa, H. Matsumura, Y. Kado, E. Mizohata, T. Inoue, S. Sano, Y. Koga, S. Kanaya, K. Takano, “Structural Basis for the *Serratia Marcescens* Lipase Secretion System: Crystal Structures of the Membrane Fusion Protein and Nucleotide-binding Domain”, *Biochemistry*, **56**, 6281-6291, (2017),  
[DOI: 10.1021/acs.biochem.7b00985](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.7b00985)
59. J. Fujita, Y. Maeda, E. Mizohata, T. Inoue, M. Kaul, A. K. Parhi, E. J. LaVoie, D. S. Pilch\*, H. Matsumura\*, “Structural Flexibility of an Inhibitor Overcomes Drug Resistance Mutations in *Staphylococcus aureus* FtsZ”, *ACS Chem. Biol.*, **12**(7), 1947-1955, (2017),  
[DOI: 10.1021/acschembio.7b00323](https://doi.org/10.1021/acschembio.7b00323)
60. H. Kajiura, N. Suzuki, Y. Tokumoto, T. Yoshizawa, S. Takeno, K. Fujiyama, Y. Kaneko, H. Matsumura, Y. Nakazawa, “Two *Eucommia* Farnesyl Diphosphate Synthases Exhibit Distinct Enzymatic Properties Leading to End Product Preferences”, *Biochimie*, **139**, 95-106, (2017),  
[DOI:10.1016/j.biochi.2017.05.001](https://doi.org/10.1016/j.biochi.2017.05.001)
61. J. Fujita, \*R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, \*H. Matsumura, “Identification of the Key Interactions in Structural Transition Pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*”, *J. Struct. Biol.*, **198**, 65-73, (2017),  
[DOI:10.1016/j.jsb.2017.04.008](https://doi.org/10.1016/j.jsb.2017.04.008)
62. M. Asakawa, Y. Fukutani, A. Savangsuksa, K. Noguchi, H. Matsunami, \*M. Yohda,



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- “Modification of the Response of Olfactory Receptors to Acetophenone by CYP1a2,” *Sci. Rep.* **7**, 10167, (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-10862-5
- DOI:10.2116/analsci.33.171
63. \*M. Yohda, K. Ikegami, Y. Aita, M. Kitajima, A. Takechi, M. Iwamoto, T. Fukuda, N. Tamura, J. Shibasaki, S. Koike, D. Komatsu, S. Miyagi, M. Nishimura, Y. Uchino, A. Shiroma, M. Shimoji, H. Tamotsu, N. Ashimine, M. Shinzato, S. Ohki, K. Nakano, K. Teruya, K. Satou, T. Hirano, O. Yagi, “Isolation and Genomic Characterization of a Dehalococcoides Strain Suggests Genomic Rearrangement during Culture,” *Sci. Rep.* **7**, 2230, (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-02381-0
64. Y. Y. Yamamoto, Y. Uno, E. Sha, K. Ikegami, N. Ishii, N. Dohmae, H. Sekiguchi, Y. C. Sasaki, \*M. Yohda, “Asymmetry in the Function and Dynamics of the Cytosolic Group II Chaperonin CCT/TRiC,” *PLoS One* **12**, e0176054, (2017),  
DOI:10.1371/journal.pone.0176054
65. S. Sonotaki, T. Takami, K. Noguchi, M. Odaka, M. Yohda, \*Y. Murakami, “Successful PEGylation of Hollow Encapsulin Nanoparticles from *Rhodococcus erythropolis* N771 without Affecting their Disassembly and Reassembly Properties,” *Biomater. Sci.* **5**, 1082-1089, (2017),  
DOI:10.1039/c7bm00207
66. K. Hasegawa, R. Negishi, M. Matsumoto, M. Yohda, \*K. Hosokawa, M. Maeda, “Specificity of MicroRNA Detection on a Power-free Microfluidic Chip with Laminar Flow-assisted Dendritic Amplification,” *Anal. Sci.* **33**, 171-177, (2017),
67. Y. Fukutani, J. Ishii, A. Kondo, T. Ozawa, H. Matsunami, \*Yohda M., “Split Luciferase Complementation Assay for the Analysis of G Protein-coupled Receptor Ligand Response in *Saccharomyces Cerevisiae*,” *Biotechnol. Bioeng.*, **114**, 1354-1361, (2017),  
DOI: 10.1002/bit.26255
68. 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),  
DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b02152
69. A. Baba, T. Kojima, \*S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-Assembly Process of Hexagonal Pt(II) Macroyclic Complexes: Effect of Solvent and Components”, *Chem. Eur. J.*, in press, (2017), DOI: 10.1002/chem.201702955  
( Hot Paper and Front Cover に選出)
70. 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 Pd<sub>2</sub>L<sub>4</sub> Cage Consisting of Rigid Ditopic Ligands” *Chem. Eur. J.*, in press, (2017), DOI: 10.1002/chem.201704285
71. S. Kai, T. Shigeta, T. Kojima, \*S. Hiraoka, “Quantitative Analysis of Self-assembly Process of a Pd<sub>12</sub>L<sub>24</sub> Coordination Sphere”, *Chem. Asian J.*, in press, (2017),  
DOI: 10.1002/asia.201701351
72. M. Yamaguchi, E. Ohta, T. Muto, T.



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- 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.*, in press, (2017), [DOI: 10.1007/s12551-017-0334-y](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0334-y)
73. S. Ahmed, T. Nakaji-Hirabayashi, T. Watanabe, T. Hohsaka, \*K. Matsumura, “Freezing Assisted Gene Delivery Combined with Polyampholyte Nanocarriers”, *ACS Biomater. Sci. Eng.*, **3**, 1677-1689, (2017), [DOI: 10.1021/acsbiomaterials.7b00176](https://doi.org/10.1021/acsbiomaterials.7b00176)
74. 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), [DOI:10.1002/asia.201700202](https://doi.org/10.1002/asia.201700202)
75. K. Ikemoto, R. Kobayashi, S. Sato, \*H. Isobe, “Synthesis and Bowl-in-bowl Assembly of a Geodesic Phenylene Bowl”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 6511-6514, (2017), [DOI:10.1002/anie.201702063](https://doi.org/10.1002/anie.201702063)  
(Very Important Paper(VIP)に採用)(Inside Back Cover Picture に採用)
76. K. Kurihara, M. Matsuo, \*T. Yamaguchi, \*S. Sato, “Synthetic Approach to Biomolecular Science by Cyborg Supramolecular Chemistry”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA)*, **1862**, 358-364, (2017), [DOI:10.1016/j.bbagen.2017.11.002](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.11.002)
77. J. Uchida, \*M. Yoshio, \*S. Sato, H. Yokoyama, \*M. Fujita, \*T. Kato, “Self-Assembly of Giant Spherical Liquid-Crystalline Complexes and Formation of Nanostructured Dynamic Gels Exhibiting Self-Healing Properties”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 14085-14089, (2017), [DOI:10.1002/anie.201707740](https://doi.org/10.1002/anie.201707740)
78. \*S. Sato, A. Yoshii, S. Takahashi, S. Furumi, M. Takeuchi, \*H. Isobe, “Chiral intertwined spirals and magnetic transitiondipole moments dictated by cylinder helicity”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **114**, 13097-13101, (2017), [DOI: 10.1073/pnas.1717524114](https://doi.org/10.1073/pnas.1717524114)
79. T. Matsuno, S. Kamata, S. Sato, A. Yokoyama, P. Sarkar, \*H. Isobe, “Assembly, Thermodynamics, and Structure of a Two-Wheeled Composite of a Dumbbell-Shaped Molecule and Cylindrical Molecules with Different Edges”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 15020-150247, [DOI:10.1002/anie.201709442](https://doi.org/10.1002/anie.201709442)
80. S. Hitosugi, S. Sato, T. Matsuno, T. Koretsune, R. Arita, \*H. Isobe, “Pentagon-Embedded Cycloarylene Molecules with Cylindrical Shapes”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 9106-9110, (2017), [DOI:10.1002/anie.201704676](https://doi.org/10.1002/anie.201704676)
81. Y. Tian, K. Ikemoto, \*S. Sato, \*H. Isobe, “[n]Cyclo-3,6-Phenanthrenylenes: Synthesis, Structure and Fluorescence”, *Chem. Asian J.*, **12**, 2093-2097, (2017), [DOI:10.1002/asia.201700563](https://doi.org/10.1002/asia.201700563)
82. \*R. Arai, “Hierarchical Design of Artificial Proteins and Complexes toward Synthetic Structural Biology”, *Biophys. Rev.*, **9**, in press, (2017), [DOI: 10.1007/s12551-017-0376-1](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0376-1)



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

83. 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.*, in press, (2017), [DOI: 10.1039/C7CP04606E](https://doi.org/10.1039/C7CP04606E)  
(裏表紙に採用)
84. \*R. Iino, T. Iida, A. Nakamura, E. Saita, \*H. You H, \*Y. Sako, “Single-molecule Imaging and Manipulation of Biomolecular Machines and Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 241-252, (2017), [DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.08.008](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.08.008)
85. \*H. Abe, S. Takashima, \*M. Inouye, “Kinetic Switching of Achirality/Chirality Memorization of meta-Ethynylpyridine Polymer by Coordination of Cu(II) Outside the Polymer”, *Heterocycles*, **95**, 730 (2017), DOI: 10.3987/COM-16-S(S)64
86. K. Hayashi, \*M. Inouye, “Reliable and Reproducible Separation of 3,9- and 3,10-Dibromoperylenes and the Photophysical Properties of their Alkynyl Derivatives”, *Eur. J. Org. Chem.*, **2017**, 4334-4337, (2017), [DOI: 10.1002/ejoc.201700807](https://doi.org/10.1002/ejoc.201700807)
87. D. Suzuki, \*H. Abe, T. Minami, S. Matsumoto, \*M. Inouye, “Preparation and Higher-Order Structures of 2,6-Pyridylene and 2,6-Pyrazylene Alternating Macrocycle with the Inner Nitrogen Atoms in All the Aromatic Rings”, *Chem. Lett.*, **46**, 1740-1742, (2017), [DOI: 10.1039/C7CP06651A](https://doi.org/10.1039/C7CP06651A)
88. K. Nogami, H. Tokumaru, G. Isokawa, T. Oyoshi, K. Fujimoto, \*M. Inouye, “Bcl-X<sub>L</sub>-Binding Helical Peptides Possessing D-Ala Residues at their C-Termini with the Advantage of Long-Lasting Intracellular Stabilities”, *Chem. Commun.*, **53**, 12104 (2017), [DOI: 10.1039/c7cc06904a](https://doi.org/10.1039/c7cc06904a)
89. Y. Ohishi, \*H. Abe, \*M. Inouye, “Saccharide Recognition and Helix Formation in Water with an Amphiphilic Pyridine–Phenol Alternating Oligomer”, *Eur. J. Org. Chem.*, in press, [DOI: 10.1002/ejoc.201701522](https://doi.org/10.1002/ejoc.201701522)
90. S. Abe, B. Maity, T. Ueno, “Functionalization of Protein Crystals with Metal Ions, Complexes and Nanoparticles”, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, in press, (2017)
91. H. Inaba, T. Ueno, “Artificial bio-nanomachines Based on Protein Needles Derived from Bacteriophage T4”, *Biophys. Rev.*, in press, (2017), [DOI: 10.1007/s12551-017-0336-9](https://doi.org/10.1007/s12551-017-0336-9)
92. 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.*, in press, (2017), [DOI: 10.1039/C7CP06651A](https://doi.org/10.1039/C7CP06651A)
93. \*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.*



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

*Commun. in press*, (2017),

DOI: 10.1039/C7CC07944C

94. Y. Sekimoto, R. Ohtani, M. Nakamura, L. F. Lindoy, \*S. Hayami, “Tunable Pressure Effects in Graphene Oxide Layers”, *Sci. Rep.*, **7**, 12159, (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-12444-x
95. F. Kobayashi, R. Ohtani, S. Teraoka, W. Kosaka, H. Miyasaka, Y. Zhang, L. F. Lindoy, \*S. Hayami, \*M. Nakamura, “Syntheses, Structures and Magnetic Properties of Tetranuclear Cubane-type and Heptanuclear Wheel-type Nickel(II) Complexes with 3-Methoxysalicylic Acid Derivatives”, *Dalton Trans.*, **46**, 8555-8561, (2017),  
DOI: 10.1039/C7DT01757J
96. \*R. Ohtani, A. Grosjean, R. Ishikawa, R. Yamamoto, M. Nakamura, J. K. Clegg, \*S. Hayami, “Zero in-plane Thermal Expansion in Guest-tunable 2D Coordination Polymers”, *Inorg. Chem.*, **56**, 6225-6233, (2017),  
DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b00282
97. R. Akiyoshi, K. Kuroiwa, S. A. Amolegbe, M. Nakaya, R. Ohtani, M. Nakamura, L. F. Lindoy, \*S. Hayami, “Supramolecular Architectures Self-assembled Using Long Chain Alkylated Spin Crossover Cobalt(II) Compounds”, *Chem. Commun.* **53**, 4685-4687, (2017), DOI: 10.1039/C7CC01501A
98. Y. Sakiyama, K. Kasho, Y. Noguchi, H. Kawakami, \*T. Katayama, “Regulatory Dynamics in the Ternary DnaA Complex for Initiation of Chromosomal Replication in *Escherichia coli*”, *Nucleic Acids Res.*, **45**, 12354-12373, (2017),  
DOI: 10.1093/nar/gkx914

99. \*T. Katayama, K. Kasho, H. Kawakami, “The DnaA cycle in *Escherichia coli*: Activation, Function and Inactivation of the Initiator Protein”, *Front. Microbiol.*, in press, (2017)
100. \*Y. Kamiya, Y. Yamada, T. Muro, K. Matsuura, \*H. Asanuma, “DNA Microcapsule for Photo-triggered Drug Release System”, *ChemMedChem*, (2017), in press, DOI: 10.1002/cmdc.201700512
101. \*Y. Kamiya, Y. Donoshita, H. Kamimoto, K. Murayama, J. Ariyoshi, \*H. Asanuma, “Introduction of 2,6-diaminopurines into Serinol Nucleic Acid (SNA) Improves Anti-miRNA Performance”, *ChemBioChem*, **18**, 1917-1922, (2017),  
DOI: 10.1002/cbic.201700272
102. T. Fukui, \*M. Takeuchi, \*K. Sugiyasu, “Impact of a Subtle Structural Difference on the Kinetic Behavior of Metastable Supramolecular Assemblies” *Polymer*, **128**, 311-316, (2017),  
DOI: 10.1016/j.polymer.2016.12.027
103. T. Fukui, \*M. Takeuchi, \*K. Sugiyasu, “Autocatalytic Time-Dependent Evolution of Metastable Two-Component Supramolecular Assemblies to Self-Sorted or Coassembled State” *Sci. Rep.*, **7**, 2425 (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-02524-3
104. T. Kureha, T. Shibamoto, S. Matsui, T. Sato, \*D. Suzuki, “Investigation of Changes in the Microscopic Structure of Anionic Poly(*N*-isopropylacrylamide-*co*-Acrylic acid) Microgels in the Presence of Cationic Organic Dyes toward Precisely Controlled Uptake/Release of Low-molecular-weight



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Chemical Compound”, *Langmuir*, **32**, 4575-4585, (2016),  
[DOI: 10.1021/acs.langmuir.6b00760](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b00760)
105. \*D. Suzuki, “Control of Spatio-temporal Structures for Polymeric Hydrogel Microspheres”, *高分子*, **66**, 6, (2017)
106. \*D. Suzuki, K. Horigome, T. Kureha, S. Matsui, T. Watanabe “Polymeric Hydrogel Microspheres; Design Synthesis, Characterization, Assembly and Applications”, *Polym. J.*, **49**, 695-702, (2017), [DOI:10.1038/pj.2017.39](https://doi.org/10.1038/pj.2017.39)  
(Focus Review に採用)
107. 渡邊拓巳、\*鈴木大介 “シード乳化重合による新奇複合ゲル微粒子の合成とその構造制御”, *Colloid & Interface Communication*, **42**, 2, (2017)
108. S. Hiroshige, T. Kureha, D. Aoki, J. Sawada, D. Aoki, \*T. Takata, \*D. Suzuki, “Formation of Tough Films via the Evaporation of Water from Dispersions of Elastomer Microspheres Crosslinked with Rotaxane Supramolecules”, *Chem. Eur. J.*, **23**, 8405-8408, (2017),  
[DOI: 10.1002/chem.201702077](https://doi.org/10.1002/chem.201702077)
109. T. Kureha, \*D. Suzuki “Nanocomposite Microgels for the Selective Separation of Halogen Compounds from Aqueous Solution”, *Langmuir*, in press (2017),  
[DOI: 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）
110. S. Matsui, T. Kureha, S. Hiroshige, M. Shibata, \*T. Uchihashi, \*D. Suzuki “Fast Adsorption of Soft Hydrogel Microspheres on Solid Surfaces in Aqueous Solution”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 12146 -12149, (2017),  
[DOI: 10.1002/anie.201705808](https://doi.org/10.1002/anie.201705808)
111. 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. Int. Ed.*, in press, (2017),  
[DOI: 10.1002/ange.201709633](https://doi.org/10.1002/ange.201709633)  
(Very Important Paper に選出)
112. T. Kureha, Y. Nishizawa, \*D. Suzuki, “Controlled Separation and Release of Organiodine Compounds using Poly(2-methoxyethyl acrylate)-analogue Microspheres”, *ACS Omega*, **2**, 7686-7694 (2017), [DOI: 10.1021/acsomega.7b01556](https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01556)
113. \*I. Nakase, K. Noguchi, I. Fujii, S. Futaki, “Vectorization of Biomacromolecules into Cells Using Extracellular Vesicles with Enhanced Internalization Induced by Macropinocytosis”, *Sci. Rep.*, **6**, 34937, (2016), [DOI: 10.1038/srep34937](https://doi.org/10.1038/srep34937)
114. K. Motoyama, R. Nishiyama, Y. Maeda, T. Higashi, Y. Kawaguchi, S. Futaki, Y. Ishitsuka, Y. Kondo, T. Irie, T. Era, \*H. Arima, “Cholesterol-lowering Effect of Octaarginine-appended  $\beta$ -Cyclodextrin in Npc1-trap-CHO Cells”, *Biol. Pharm. Bull.*, **39**, 1823, (2016),  
[DOI: 10.1248/bpb.b16-00369](https://doi.org/10.1248/bpb.b16-00369)
115. \*I. Nakase, N. Ueno, M. Katayama, K. Noguchi, T. Takatani-Nakase, N. B. Kobayashi, T. Yoshida, I. Fujii, S. Futaki, “Receptor Clustering and Activation by Multivalent Interaction through Recognition Peptides Presented on Exosomes”, *Chem. Commun.*, **53**, 317, (2016),  
[DOI: 10.1039/C6CC06719K](https://doi.org/10.1039/C6CC06719K)



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

116. C. M. Backlund, F. Sgolastra, R. Otter, L. Minter, T. Takeuchi, S. Futaki, \*G. N. Tew, “Increased Hydrophobic Block Length of PTDMs Promotes Protein Internalization”, *Polym. Chem.*, **7**, 7514, (2016),  
DOI: 10.1039/C6PY01615D
117. \*I. Nakase, K. Noguchi, A. Aoki, T. Takatani-Nakase, I. Fujii, S. Futaki, “Arginine-rich Cell-penetrating Peptide-modified Extracellular Vesicles for Active Macropinocytosis Induction”, *Sci. Rep.*, **7**, 1991, (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-02014-6
118. M. Akishiba, T. Takeuchi, Y. Kawaguchi, K. Sakamoto, H. Yu, I. Nakase, T. Takatani-Nakase, F. Madani, A. Gräslund, \*S. Futaki, “Cytosolic Antibody Delivery by Lipid-sensitive Endosomolytic Peptide”, *Nat. Chem.* **9**, 751, (2017), DOI: 10.1038/NCHEM.2779  
下記でハイライト（紹介）されました  
News & Views of *Nat. Chem.* 9(8), 727–728 (2017): DOI: 10.1038/NCHEM.2837  
C&EN 95(30) 8–9 (2017) (issue Date: July 24, 2017) 京都大学 HP: [http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research\\_results/2017/170523\\_1.html](http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2017/170523_1.html)  
京都新聞: <http://www.kyoto-np.co.jp/environment/article/20170523000070>
119. T. Murayama, T. Masuda, S. Afonin, K. Kawano, T. Takatani-Nakase, H. Ida, Y. Takahashi, T. Fukuma, A. S. Ulrich, \*S. Futaki, “Loosening of Lipid Packing Promotes Oligoarginine Entry into Cells”, *Angew. Chem. Int. Ed., Engl.*, **56**(26), 7644–7647, (2017),  
DOI:10.1002/anie.201703578  
下記でハイライト（紹介）されました
- ChemistryViews (Wiley-VCH & ChemPubSoc Europe):  
[http://www.chemistryviews.org/details/ezine/10567015/Peptide\\_Delivery\\_Mechanisms.html](http://www.chemistryviews.org/details/ezine/10567015/Peptide_Delivery_Mechanisms.html) (issue Date: June 28, 2017)
120. \*二木史朗  
“アルギニンに富む膜透過ペプチドの細胞内移行”, 生化学, 89(1), 8–14, (2017),  
DOI:10.14952/SEIKAGAKU.2017.890008
121. \*S. Futaki, I. Nakase, “Cell-Surface Interactions on Arginine-Rich Cell-Penetrating Peptides Allow for Multiplex Modes of Internalization”, *Acc. Chem. Res.*, **50**, 2449–2456, (2017),  
DOI: 10.1021/acs.accounts.7b00221
122. T. Sagami, S. Umemoto, Y. O Tahara, M. Miyata, Y. Yonamine, D. Ishikawa, T. Mori, K. Ariga, H. Miyake, \*S. Shinoda, “pH-Responsive Cotton Effects in the d-d Transition Band of Self-Assembling Copper(II) Complexes with a Cholesteryl-armed Ligand”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **90**, 739–745 (2017),  
DOI: 10.1246/bcsj.20170054
123. Y. Mori, \*Y. Okamoto, “Conformational Changes of Ubiquitin under High Pressure Conditions: A Pressure Simulated Tempering Molecular Dynamics Study”, *J. Comput. Chem.*, **38**, 1167–1173, (2017),  
DOI:10.1002/jcc.24767
124. \*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



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Receptor IIIa”, *Sci. Rep.*, **7**, 13780 (10 pages), (2017),  
[DOI:10.1038/s41598-017-13845-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-13845-8)
- and Quality Control of Biopharmaceuticals in Japan,” *J. Pharm. Sci.*, **106**, 3431-3437, (2017), [DOI: 10.1016/j.xphs.2017.07.024](https://doi.org/10.1016/j.xphs.2017.07.024)
125. \*N. Nishikawa, Y. Sakae, T. Gouda, Y. Tsujimura, Y. Okamoto, “Two Major Stable Structures of Amyloid-forming Peptides: Amorphous Aggregates and Amyloid fibrils”, *Molecular Simulation*, **43**, 1370-1376, (2017),  
[DOI:10.1080/08927022.2017.1359746](https://doi.org/10.1080/08927022.2017.1359746)
126. 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 Mmm1-Mdm12 of ERMES between Membranes”, *J. Cell Biol.* , in press.
127. K. Ishii, M. Zhou, \*S. Uchiyama, “Native Mass Spectrometry for Understanding Dynamic Protein Complex,” *Biochim Biophys. Acta.*, **1862**, 275-286, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.09.019](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.09.019)
128. Q. Wang, R. Marchetti, S. Prsic, K. Ishii, Y. Arai, I. Ohta, S. Inuki, S. Uchiyama, A. Silipo, A. Molinaro, R. N. Husson, K. Fukase, \*Y. Fujimoto, “Comprehensive Study of the Interaction between Peptidoglycan Fragments and the Extracellular Domain of Mycobacterium tuberculosis Ser/Thr Kinase PknB,” *ChemBioChem.*, **18**, 2094-2098, (2017),  
[DOI: 10.1002/cbic.201700385](https://doi.org/10.1002/cbic.201700385)
129. \*A. Ishii-Watabe, H. Shibata, A. Harazono, M. Hyuga, M. Kiyoshi, S. Saitoh, T. Iwura, T. Torisu, Y. Goda, S. Uchiyama, “Recent Topics of Research in the Characterization
130. R. Phengchat, H. Takata, \*S. Uchiyama, K. Fukui, “Calcium Depletion Destabilises Kinetochore Fibres by the Removal of CENP-F from the Kinetochore,” *Sci. Rep.*, **7**, 7335, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-07777-6](https://doi.org/10.1038/s41598-017-07777-6)
131. R. Poonperm, H. Takata, S. Uchiyama, \*K. Fukui, “Interdependency and Phosphorylation of KIF4 and Condensin I are Essential for Organization of Chromosome Scaffold”, *PloS one*, **12**, e0183298, (2017),  
[DOI: 10.1371/journal.pone.0183298](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0183298)
132. N. Shinozaki, R. Hashimoto, K. Fukui, \*S. Uchiyama, “Efficient Generation of Single Domain Antibodies with High Affinities and Enhanced Thermal Stabilities”, *Sci. Rep.*, **7**, 5794, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-06277-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-06277-x)
133. T. Torisu, T. Maruno, Y. Hamaji, T. Ohkubo, \*S. Uchiyama, “Synergistic Effect of Cavitation and Agitation on Protein Aggregation” *J Pharm Sci.*, **106**, 521-529, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.xphs.2016.10.015](https://doi.org/10.1016/j.xphs.2016.10.015)
134. T. Torisu, T. Maruno, S. Yoneda, Y. Hamaji, S. Honda, \*T. Ohkubo, \*S. Uchiyama, “Friability Testing as a New Stress-Stability Assay for Biopharmaceuticals” *J Pharm Sci.*, **106**, 2966-2978, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.xphs.2017.05.035](https://doi.org/10.1016/j.xphs.2017.05.035)



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

135. 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.*, in press, (2017),  
[DOI: 10.1039/c7cp06299k](https://doi.org/10.1039/c7cp06299k)
136. 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),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-11135-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-11135-x)
137. M. Iwamoto, S. Oiki, "Membrane Perfusion of Hydrophobic Substances Around Channels Embedded in the Contact Bubble bilayer", *Sci. Rep.*, **7**, 6857, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-07048-4](https://doi.org/10.1038/s41598-017-07048-4)
138. S. Oiki, M. Iwamoto, "Channel-Membrane Interplay in Lipid Bilayer Membranes Manipulated through Monolayer Technologies", *Biol. Pharm. Bull.*, in press.
139. 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”, 生物物理印刷中
140. 岩本真幸, 老木成稔, “脂質平面膜とパッチクランプのハイブリッドとしてのCBB(接触液胞2重膜)法”, 生物物理, **57(6)**, 313-317, (2017),  
[DOI: 10.2142/biophys.57.313](https://doi.org/10.2142/biophys.57.313)
141. \*M. Yamauchi, \*H. Okumura, "Replica-permutation Method for Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations and its Application to Reveal Temperature and Pressure Dependence of Folded, Misfolded, and Unfolded States of Chignolin", *J. Chem. Phys.*, **147**, 184107, (15 pages), (2017),  
[DOI: 10.1063/1.4996431](https://doi.org/10.1063/1.4996431)
142. \*H. Okumura, M. Higashi, Y. Yoshida, H. Sato, R. Akiyama, "Theoretical Approaches for Dynamical Ordering of Biomolecular Systems", *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 212-228, (2018),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.001](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.10.001)
143. R. Sato, J. Kozuka, \*M. Ueda, R. Mishima, \*Y. Kumagai, A. Yoshimura, M. Minoshima, S. Mizukami, \*K. Kikuchi, "Intracellular Protein Labeling Probes for Multicolor Single-molecule Imaging of Immune Receptor-adaptor Molecular Dynamics", *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 17397-17404, (2017), [DOI: 10.1021/jacs.7b08262](https://doi.org/10.1021/jacs.7b08262)
144. Y. Matsui, \*S. Mizukami, \*K. Kikuchi, "Ratiometric Imaging of Intracellular Mg<sup>2+</sup> Dynamics Using a Red Fluorescent Turn-off Probe and a Green Fluorescent Turn-on Probe", *Chem. Lett.*, **47**, 23-26, (2017),  
[DOI: 10.1246/cl.170918](https://doi.org/10.1246/cl.170918)
145. Y. Hori, S. Hirayama, \*K. Kikuchi, "Development of Cyanine Probes with Dinitrobenzene Quencher for Rapid Fluorogenic Protein Labeling", *Philos. Trans. R. Soc. A*, **375**, 20170018, (2017),  
[DOI: 10.1098/rsta.2017.0018](https://doi.org/10.1098/rsta.2017.0018)
146. Y. Matsui, Y. Funato, H. Imamura, H. Miki, \*S. Mizukami, \*K. Kikuchi, "Visualization of Long-term Mg<sup>2+</sup> Dynamics in Apoptotic Cells with a Novel Targetable Fluorescent Probe", *Chem. Sci.*, in press, (2017),  
[DOI: 10.1039/c7sc03954a](https://doi.org/10.1039/c7sc03954a)



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

147. Y. Matsui, K. K. Sadhu, \*S. Mizukami, \*K. Kikuchi, “Highly Selective Tridentate Fluorescent Probes for Visualizing Intracellular Mg<sup>2+</sup> Dynamics without Interference from Ca<sup>2+</sup> Fluctuation”, *Chem. Commun.*, **53**, 10644-10647, (2017),  
[DOI: 10.1039/c7cc06141b](https://doi.org/10.1039/c7cc06141b) (2017),  
[DOI: 10.2142/biophysico.14.0\\_75](https://doi.org/10.2142/biophysico.14.0_75)
148. M. Minoshima, \*K. Kikuchi, “Photostable and Photoswitching Fluorescent Dyes for Super-Resolution Imaging”, *J. Biol. Inorg. Chem.*, **22**, 1–14, (2017),  
[DOI:10.1007/s00775-016-1435-y](https://doi.org/10.1007/s00775-016-1435-y)
149. K. Okamoto., M. Hiroshima, \*Y Sako, “Single-molecule fluorescence based analysis of protein conformation, interaction, and oligomerization in cellular systems,” *Biophys. Rev.*, in press,
150. Y. Nakamura, N. Umeki, M. Abe \*Y Sako, “Mutation-specific Mechanisms of Hyperactivation of Noonan Syndrome SOS Molecules Detected with Single-molecule Imaging in Living Cells,” *Sci. Rep.* **7**, 14153, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-14190-6](https://doi.org/10.1038/s41598-017-14190-6)
151. \*R. Iino, T. Iida, A. Nakamura, E. Saita, H. You, Y. Sako, “Single-molecule Imaging and Manipulation of Biomolecular Machines and Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 241-252, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.08.008](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.08.008)
152. R. Yoshizawa, \*N. Umeki, M. Yanagawa, M. Murata, \*Y. Sako, “Single-molecule Fluorescence Imaging of RaLGDS on Cell Surfaces during Signal Transduction to Ras to Ral,” *Biophys. Physicobiol.* **14**, 75-84,
153. H. Takatsu, M. Takayama, T. Naito, N. Takada, K. Tsumagari, Y. Ishihama, K. Nakayama, \*H.-W. Shin, “Phospholipid Flippase ATP11C is Endocytosed and Downregulated Following Ca<sup>2+</sup>-mediated Protein Kinase C Activation,” *Nat. Commun.*, **8**, 1423, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41467-017-01338-1](https://doi.org/10.1038/s41467-017-01338-1)
154. K. H. Tomaszowski, N. Hellmann, V. Ponath, H. Takatsu, H.-W. Shin, \*B. Kaina, “Uptake of Glucose-conjugated MGMT Inhibitors in Cancer Cells: Role of Flippases and Type IV P-type ATPases,” *Sci. Rep.*, **7**, 13925, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-14129-x](https://doi.org/10.1038/s41598-017-14129-x)
155. A. Hanai, M. Ohgi, C. Yagi, T. Ueda, H.-W. Shin, \*K. Nakayama, “Class I Arfs (Arf1 and Arf3) and Arf6 are Localized to the Flemming Body and Play Important Roles in Cytokinesis”, *J. Biochem.*, **159**, 201, (2016),  
[DOI: 10.1093/jb/mvv088](https://doi.org/10.1093/jb/mvv088) (2017 年 JB 論文賞)
156. P. Bernadó, N. Shimizu, G. Zaccai, H. Kamikubo, M. Sugiyama, “Solution Scattering Approaches to Dynamical Ordering in Biomolecular Systems”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 253-274, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.015](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.10.015)
157. E. Hibino, R. Inoue, M. Sugiyama, J. Kuwahara, K. Matsuzaki, M. Hoshino, “Identification of Heteromolecular Binding Sites in Transcription Factors Sp1 and TAF4 Using High-resolution NMR Spectroscopy”, *Protein Science*, **26**, 2280-2290, (2017),



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

DOI: 10.1002/pro.3287

158. 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),  
DOI: 10.1016/j.bbrep.2017.08.004

159. J. Trewella, A. P. Duff, D. Durand, F. Gabel, J. M. Guss, W. A. Hendrickson, G. L. Hura, D. A. Jacques, N. M. Kirby, A. H. Kwan, J. Perez, L. Pollack, T. M. Ryan, A. Sali, D. Schneidman-Duhovny, T. Schwede, D. I. Svergun, M. Sugiyama, J. A. Tainer, P. Vachette, J. Westbrook, A. E. Whitten, “2017 Publication Guidelines for Structural Modelling of Small-angle Scattering Data from Biomolecules in Solution: an Update”, *Acta Crystallographica*, **D73**, (2017), 710-728,  
DOI: 10.1107/S2059798317011597

160. M. Sugiyama, H. Nakagawa, R. Inoue, and Y. Kawakita, “Neutron Biology for Next Generation”, *J-PARC-Review*, 2017-024, (2017), 1-46, (Japanese)

161. \*S. Kato, T. Matsui, C. Gatsogiannis, \*Y. Tanaka, “Molluscan Hemocyanin: Structure, Evolution, and Physiology”, *Biophys. Rev.*, in press, (2017),  
DOI:10.1007/s12551-017-0349-4

162. 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, “A Novel tRNA Channeling Mechanism for the Synthesis of Cys-tRNACys in Indirect Pathway”, *Nature Commun.*, in press, (2017)

163. T. Kunthic, H. Watanabe, R. Kawano, Y. Tanaka, B. Promdonkoy, M. Yao, \*P. Boonserm, “pH Regulates Pore Formation of a Protease Activated Vip3Aa from *Bacillus thuringiensis*”, *Biochim. Biophys. Acta (BBA), Biomembranes*, **1859**, 2234-2241, (2017),  
DOI: 10.1016/j.bbamem.2017.08.018

164. T.H. Liu, K.I. Yuyama, T. Hiramatsu, N. Yamamoto, \*E. Chatani, \*H. Miyasaka, T. Sugiyama \*H. Masuhara, “Femtosecond-Laser-Enhanced Amyloid Fibril Formation of Insulin” *Langmuir*, **33**, 8311-8318, (2017),  
DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b01822

165. 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.*, in press, DOI: 10.1074/jbc.M117.813097

166. E. Chatani, N. Yamamoto, “Recent Progress on Understanding the Mechanisms of Amyloid Nucleation” *Biophys. Rev.*, in press, DOI: 10.1007/s12551-017-0353-8

167. 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*, in press



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

168. \*寺内一姫, 大山克明, 浅井智広  
「ブルーネイティブ電気泳動による時計  
タンパク質 KaiC の動的構造解析」  
電気泳動, 61, 107-110, (2017)
169. \*T. Teramoto, M. Yoshimura, C. Azai, K. Terauchi, T. Ohota, “Determination of Carbon-to-nitrogen Ratio in the Filamentous and Heterocystous Cyanobacterium *Anabaena* sp. PCC 7120 with Single-cell soft X-ray Imaging”, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **849**, 012005, (2017),  
[DOI:10.1088/1742-6596/849/1/012005](https://doi.org/10.1088/1742-6596/849/1/012005)
170. T. Nagai, \*K. Mizuno, “Jasplakinolide Induces Primary Cilium Formation through Cell Rand YAP Inactivation”, *PLoS ONE*, **12**, e0183030, (2017),  
[DOI: 10.1371/journal.pone.0183030](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0183030)
171. K. Geng, S. Kumar, S. G. Kimani, V. Kholodovych, C. Kasikara, K. Mizuno, O. Sandiford, P. Rameshwar, S. V. Kotenko, R. B. Birge, “Requirement of Gamma-carboxyglutamic Acid Modification and Phosphatidylserine Binding for the Activation of Tyro3, Axl, and Mertk Receptors by Growth Arrest-specific 6,” *Front. Immunol.* **8**, 1521, (2017),  
[DOI: 10.3389/fimmu.2017.01521](https://doi.org/10.3389/fimmu.2017.01521)
172. K. Takahashi, T. Nagai, S. Chiba, K. Nakayama, \*K. Mizuno, “Glucose Deprivation Induces Primary Cilium Formation through mTORC1 Inactivation,” *J. Cell Sci.*, in press (2017)
173. 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.*, in press, (2017),  
[DOI: 10.1039/C7CP04606E](https://doi.org/10.1039/C7CP04606E)
174. \*K. Okamoto, N. Miyazaki, C. Song, FRNC. Maia, HKN. Reddy, C. Abergel, J-M. Claverie, J. Hajdu, M. Svenda \*K. Murata, “Structural Variability and Complexity of the Giant Pithovirus Sibericum Particle Revealed by High-Voltage Electron Cryo-tomography and Energy-filtered Electron Cryo-microscopy.”, *Sci. Rep.*, **7**, 13291, (2017),  
[DOI:10.1038/s41598-017-13390-4](https://doi.org/10.1038/s41598-017-13390-4)
175. \*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),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-12283-w](https://doi.org/10.1038/s41598-017-12283-w)
176. K. Murata, \*M. Wolf, “Cryo-electron Microscopy for Structural Analysis of Dynamic Biological Macromolecules.”, *Biochim. Biophys. Acta, (BBA), Gen. Subj.*, **1862**, 324-334, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.07.020](https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2017.07.020)
177. M. Conley, E. Emmott, R. Orton, D. Taylor, DG. Carneiro, K. Murata, IG. Goodfellow, GS. Hansman, \*D. Bhella , “Vesivirus 2117 Capsids More Closely Resemble Sapovirus and Lagovirus Particles than Other Known Vesivirus Structures”, *J. Gen. Virol.*, **98**, 68–76, (2017),



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

[DOI: 10.1099/jgv.0.000658](https://doi.org/10.1099/jgv.0.000658)

178. K. Sai, S. Wang, A. Kaito, T. Fujiwara, T. Maruo, Y. Itoh, M. Miyata, S. Sakakibara, N. Miyazaki, K. Murata, Y. Yamaguchi, T. Haruta, H. Nishioka, Y. Motojima, M. Komura, K. Kimura, \*K. Mandai, \*Y. Takai, \*A. Mizoguchi\*, “Multiple Roles of Afadin in the Ultrastructural Morphogenesis of Mouse Hippocampal Mossy Fiber Synapses.”, *J. Comp. Neurol.*, **525**, 2719–2734, (2017), [DOI: 10.1002/cne.24238](https://doi.org/10.1002/cne.24238)
179. N. Oyama, J. J. Molina, \*R. Yamamoto, “Do Hydrodynamically Assisted Binary Collisions Lead to Orientational Ordering of Microswimmers?”, *Eur. Phys. J. E* **40**, 95 (2017),  
[DOI: 10.1140/epje/i2017-11586-4](https://doi.org/10.1140/epje/i2017-11586-4)
180. S. K. Schnyder, Y. Tanaka, J. J. Molina, \*R. Yamamoto, “Collective Motion of Cells Crawling on a Substrate: Roles of Cell Shape and Contact Inhibition”, *Sci. Rep.*, **7**, 5163, (2017),  
[DOI: 10.1038/s41598-017-05321-0](https://doi.org/10.1038/s41598-017-05321-0)
181. N. Oyama, J. J. Molina, \*R. Yamamoto, “Simulations of Model Micro-swimmers with Fully Resolved Hydrodynamics,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 101008, (2017),  
[DOI: 10.7566/JPSJ.86.101008](https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.101008)
182. \*T. Sawada, Y. Inomata, M. Yamagami, \*M. Fujita, “Self-Assembly of a Peptide [2]Catenane through  $\Omega$ -loop Folding,” *Chem. Lett.*, **46**, 1119–1121, (2017),  
[DOI: 10.1246/cl.170438](https://doi.org/10.1246/cl.170438)  
(Editor’s choice 論文として採択)
183. \*T. Sawada, M. Yamagami, S. Akinaga, T.

- Miyaji, \*M. Fujita, “Porous Peptide Complexes by a Folding-and-Assembly Strategy,” *Chem. Asian J.* **12**, 1715–1718, (2017),  
[DOI: 10.1002/asia.201700458](https://doi.org/10.1002/asia.201700458)  
(Very Important Paper として採択)
184. R. Harada\*, Y. Shigeta, “An Assessment of Optimal Time Scale of Conformational Resampling in Parallel Cascade Molecular Dynamics”, *Molecular Simulation*, in press, (2017),  
[DOI:10.1080/08927022.2017.1362696](https://doi.org/10.1080/08927022.2017.1362696)
185. R. Harada\*, Y. Shigeta, “Dynamic Specification of Initial Structures in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) Efficiently Promotes Biologically Relevant Rare Events”, *Bull. Chem. Soc. Jap.*, **90**, 1236-1243, (2017),  
[DOI:10.1246/bcsj.20170177](https://doi.org/10.1246/bcsj.20170177)
186. R. Harada\*, Y. Shigeta, “Temperature-shuffled parallel cascade selection molecular dynamics accelerates the structural transitions of proteins”, *J. Comput. Chem., (Rapid Communication)*, **38**, 2671–2674, (2017),  
[DOI: 10.1002/jcc.25060](https://doi.org/10.1002/jcc.25060)
187. R. Harada\*, Y. Shigeta, “Structural Dissimilarity Sampling with Dynamically Self-Guiding Selection”, *J. Comput. Chem.*, **38**, 1921-1929, (2017),  
[DOI: 10.1002/jcc.24837](https://doi.org/10.1002/jcc.24837)
188. Y. Shigeta\*, R. Harada, R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, T. K. M. Bui, A. Sato, A. Kyan, Y. Ishii, M. Kimatsuka, S. Yamasaki, M. Kayanuma, M. Shoji, “Classical Cumulant Dynamics for Statistical Chemical Physics”,



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Molecular Simulation*, **43**(13-16), 1260-1268,  
(2017),  
[DOI: 10.1080/08927022.2017.1315770](https://doi.org/10.1080/08927022.2017.1315770)
189. J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta\*, H. Matsumura\*, “Identification of the Key Interactions in Structural Transition Pathway of FtsZ from *Staphylococcus Aureus*”, *J. Struct. Biol.*, **198**, 65-73, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.jsb.2017.04.008](https://doi.org/10.1016/j.jsb.2017.04.008)
190. R. Harada\*, Y. Shigeta, “How does the Number of Initial Structures Affect the Conformational Sampling Efficiency and Quality in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)?”, *Chem. Lett.*, **46**, 862-865, (2017),  
[DOI: 10.1246/cl.170207](https://doi.org/10.1246/cl.170207)
191. R. Harada\*, Y. Shigeta, “Efficient Conformational Search Based on Structural Dissimilarity Sampling: Applications to Reproductions of Structural Transitions on Maltodextrin Binding Protein”, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 1411-1423, (2017),  
[DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01112](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.6b01112)
192. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda\*, “Cooperatively Interlocked [2+1]-Type  $\pi$ -System-Anion Complexes”, *Chemistry A European Journal*, **23**, 4160–4168, (2017),  
[DOI: 10.1002/chem.201605765](https://doi.org/10.1002/chem.201605765)
193. R. Harada\*, Y. Takano, Y. Shigeta, “Common Folding Processes of Mini Proteins: Partial Formations of Secondary Structures Initiate the Immediate Protein Folding”, *J. Comput. Chem.*, **38**, 790-797, (2017), DOI:10.1002/jcc.24748
- (Front Coverに採用)
194. Y. Sugano, A. Furukawa, O. Nureki, Y. Tanaka, \*T. Tsukazaki, “SecY-SecA Fusion Protein Retains the Ability to Mediate Protein Transport,” *PLoS One*, **12**, e0183434, (2017),  
[DOI: 10.1371/journal.pone.0183434](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0183434)
195. Y. Tanaka, S. Iwaki, \*T. Tsukazaki, “Crystal Structure of a Plant Multidrug and Toxic Compound Extrusion Family Protein,” *Structure*, **25**, 1455-1460, (2017),  
[DOI: 10.1016/j.str.2017.07.009](https://doi.org/10.1016/j.str.2017.07.009)
196. Y. Daimon, C. Iwama-Masui, Y. Tanaka, T. Shiota, T. Suzuki, R. Miyazaki, H. Sakurada, T. Lithgow, N. Dohmae, H. Mori, \*T. Tsukazaki, \*S. Narita, \*Y. Akiyama, “The TPR Domain of BepA is Required for Productive Interaction with Substrate Proteins and the  $\beta$ -barrel Assembly Machinery Complex”, *Mol. Microbiol.*, **106**, 760-776, [DOI: 10.1111/mmi.13844](https://doi.org/10.1111/mmi.13844)
197. \*T. Miura, T. Nakamuro, S. G. Stewart, Y. Nagata, \*M. Murakami, “Synthesis of Enantiopure C3-Symmetric Triangular Molecules”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 3334, (2017), [DOI: 10.1002/anie.201612585](https://doi.org/10.1002/anie.201612585)
198. F. K. C. Leung, F. Ishiwari, Y. Shoji, T. Nishikawa, R. Takeda, Y. Nagata, M. Suginome, Y. Uozumi, \*Y. M. A. Yamada, \*T. Fukushima, “Synthesis and Catalytic Applications of a Triptycene-Based Monophosphine Ligand for Palladium-Mediated Organic Transformations”, *ACS Omega* **2**, 1930, (2017),  
[DOI: 10.1021/acsomega.7b00200](https://doi.org/10.1021/acsomega.7b00200)
199. H. Hasegawa, \*Y. Nagata, \*K. Terao, M.



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Suginome, “Synthesis and Solution Properties of a Rigid Helical Star Polymer: Three-Arm Star Poly(quinoxaline-2,3-diyl)”, *Macromolecules* **50**, 7491, (2017),  
DOI: 10.1021/acs.macromol.7b01797
200. Y. Matsushita, H. Sekiguchi, J.W. Chang, M. Nishijima, K. Ikezaki, D. Hamada, Y. Goto, \*Y.C. Sasaki, “Nanoscale Dynamics of Protein Assembly Networks in Supersaturated Solutions..”, *Sci. Rep.*, **7**, 13883, (2017),  
DOI: 10.1038/s41598-017-14022-7
201. M. Nawata, H. Tsutsumi, Y. Kobayashi, S. Unzai, S. Mine, T. Nakamura, K. Uegaki, H. Kamikubo, M. Kataoka, \*D. Hamada, “Heat-induced Native Dimerization Prevents Amyloid Formation by Variable Domain from Immunoglobulin Light-chain REI”, *FEBS J.* **284**, 3114-3127, DOI: 10.1111/febs.14181
202. S. Okada, S. Kowashi, L. Schweighauser, K. Yamanouchi, \*K. Harano, \*E. Nakamura, “Direct Microscopic Analysis of Individual C<sub>60</sub> Dimerization Events: Kinetics and Mechanisms” *J. Am. Chem. Soc.* in press,  
DOI: 10.1021/jacs.7b09776
203. R. Aoki, R. Toyoda, J. F. Kögel, \*R. Sakamoto, J. Kumar, Y. Kitagawa, K. Harano, T. Kawai, \*H. Nishihara, “Bis(dipyrinato)zinc(II) Complex Chiroptical Wires: Exfoliation into Single Strands and Intensification of Circularly Polarized Luminescence,” *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 16024–16027, (2017),  
DOI: 10.1021/jacs.7b07077
204. \*原野幸治, “お茶のなかの分子世界”, *現代化学*, **556**, 42–45, (2017)
205. L. Schweighauser, \*K. Harano, \*E. Nakamura, “Experimental Study on Interconversion between Cubic MOF-5 and Square MOF-2 Arrays,” *Inorg. Chem. Commun.*, **84**, 1–4, (2017),  
DOI: 10.1016/j.inoche.2017.07.009
206. H. Nitta, \*K. Harano, M. Isomura, E. H. G. Backus, M. Bonn, \*E. Nakamura, “Conical Ionic Amphiphiles Endowed with Micellization Ability but Lacking Air- and Oil–Water Interfacial Activity,” *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 7677–7680, (2017),  
DOI: 10.1021/jacs.7b01596
207. M. Yamada, N. Yoshinari, N. Kuwamura, T. Saito, S. Okada, S. P. Maddala, K. Harano, E. Nakamura, K. Yamagami, K. Yamanaka, A. Sekiyama, T. Suenobu, Y. Yamada, \*T. Konno, “Heterogeneous Catalase-like Activity of Gold(I)-Cobalt(III) Metallosupramolecular Ionic Crystals”, *Chem. Sci.*, **8**, 2671–2676, (2017),  
DOI: 10.1039/C6SC04993A
208. 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),  
DOI: 10.1021/acs.joc.7b02185
209. A. Kuno, N. Tohnai, N. Yasuda, \*H. Maeda, “Conjunction of Pyrrole and Amide Moieties: Highly Anion-Responsive π-Electronic Molecules Forming Ion-Free and Ion-Pairing Assemblies,” *Chem. Eur. J.*, **23**, 11357–11365, (2017),  
DOI: 10.1002/chem.201701921
210. \*T. Fujita, Y. Haketa, H. Maeda, T. Yamamoto,



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

“Relating Stacking Structures and Charge Transport in Crystal Polymorphs of the Pyrrole-Based  $\pi$ -Conjugated Molecule,” *Org. Electron.*, **49**, 53-63, (2017),  
DOI: 10.1016/j.orgel.2017.06.028

211. K. Nakamura, \*H. Maeda, “Pyrrole-Based Hydrogen-Bonding Dimers Providing Discotic Columnar Structures,” *Chem. Lett.*, **46**, 1269-1271, (2017),  
DOI: 10.1246/cl.170487

212. R. Yamakado, M. Hara, S. Nagano, T. Seki, \*H. Maeda, “Photo-Responsive Soft Ionic Crystals: Ion-Pairing Assemblies of Azobenzene Carboxylates,” *Chem. Eur. J.*, **23**, 9244-9248, (2017),  
DOI: 10.1002/chem.201701925

213. Y. Sasano, N. Yasuda, \*H. Maeda, “Deprotonated meso-hydroxyporphyrin as a stable  $\pi$ -electronic anion: the building unit of ion-pairing assembly,” *Dalton Trans.* **46**, 8924-8928, (2017),  
DOI: 10.1039/c7dt01635b  
(インサイドカバーに採択)

### 図書

1. 黒井邦巧、寺嶋正秀、「圧力印加過渡回折格子法による反応中のタンパク質圧縮率の時間分解計測」, 热测定, **43**, 66-71, (2016)
2. 寺嶋正秀、「分子基盤に基づく生体機能ネットワークとダイナミクス」、国際高等研究所アニュアルレポート 2015、(2016)
3. 中曾根祐介、寺嶋正秀、青色光センサーナンパク質フォトトロピンの光制御機構」、物性科学センター誌、 29、3-11、 (2016)
4. 寺嶋正秀 (分担執筆)、「過渡回折格子法」、光と生命の事典、356-357、 2016、 朝倉書店 ISBN978-4-254-17161-7
5. M.Terazima, “Time-Resolved Detection of Protein Fluctuations During Reactions”, Molecular Science of Fluctuations Toward Biological Functions, Eds., M.Terazima, M.Kataoka, R.Ueoka, 1-28, (2016), Springer. ISBN 978-4-431-55840-8 分担執筆
6. 平岡秀一、「“水の不思議と自己組織化」、現代化学 No.555、(6)、34-36、(2017)
7. 平岡秀一、「溶液における分子認識と自己集合の原理：分子間相互作用」、サイエンス社、(2017)、ISBN 978-4-7819-1403-9
8. \*秋山修志、「概日時計因子の構造や動態を調べる意義とは?」、生物物理 56、 266-270、 (2016)
9. 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, in press
10. 青木大輔、高田十志和  
「高分子鎖の可動な連結を利用するトポロジー変換と特性制御」、高分子、 65(5)、 pp 217-219、 (2017)
11. 青木大輔、高田十志和  
「高分子鎖の機械的な連結による分岐-線状トポロジー変換-新しい刺激応答高分子の創製」、日本ゴム協会誌、 90(6)、



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

pp 283-289、 (2017)

12. 飯沼裕美, 大場優生, 河村成肇, 高妻孝光, 菅原洋子, 高柳敏幸, 立川仁典, 「新しい量子ビーム・ミュオン分光と理論的アプローチ」 J. Comput. Chem. Jpn., vol. 16 , A12-A17 (2017)、 (in Japanese)
13. 川島雪生, 澤田啓介, 中嶋隆人, 立川仁典, 「酢酸-リン酸アニオンクラスターの分子間水素結合における核の量子揺らぎの効果に関する理論的研究」, J. Comput. Chem. Jpn. 「量子水素の科学」特集号、 vol. 15, 203-209、 (2016)、 (in Japanese)
14. 木下郁雄, 北幸海, 立川仁典, 橋勝, 「カーボンナノウォールの電子状態と水素吸着」 J. Comput. Chem. Jpn. 「量子水素の科学」特集号、 vol. 15, 177-183, (2016)、 (in Japanese)
15. 宇田川太郎, 常田貴夫, 立川仁典, 「多成分密度汎関数のための電子-核相関汎関数の開発」 J. Comput. Chem. Jpn. 「量子水素の科学」特集号、 vol. 15 , 143-147、 (2016)、 (in Japanese)
16. 立川仁典, 「特集「量子水素の科学」に寄せて」 J. Comput. Chem. Jpn. 「量子水素の科学」特集号、 vol. 15, A51, (2016), (in Japanese)
17. 立川仁典、 北幸海、 小山田隆行、「原子・分子の陽電子束縛機構と対消滅機構解明のための高精度第一原理計算 (Accurate ab initio calculation for the elucidation of the mechanism of positron binding and pair-annihilation in atoms and molecules)」 陽電子科学、 vol. 7, , 1-11, (2016)、 (in Japanese)
18. \*A. Naito, Y. Makino, Y. Tasei, I. Kawamura “Photoirradiation and Microwave Irradiation NMR Spectroscopy,” Experimental approaches of NMR spectroscopy – Methodology and Application of Life Science and Material Science-. The NMR Society of Japan ed. Springer, in press (2017), DOI: 10.1007/978-98-10-5966-7\_5
19. \*I. Kawamura, K. Norisada, A. Naito. Structure Determination of Membrane Peptides and Proteins by Solid-state NMR. Expefrimental Approaches of NMR Spectroscopy. Methodology and Application of Life Science and Materials Science. The NMR Society of Japan. Ed. Springer,in press, (2017), DOI: [10.1007/978-981-10-5966-7\\_9](https://doi.org/10.1007/978-981-10-5966-7_9)
20. 平岡秀一、 “水の不思議と自己組織化”、 現代化学 No. 555, (6), 34–36、 (2017)
21. 平岡秀一、 “溶液における分子認識と自己集合の原理：分子間相互作用”、 サイエンス社、 (2017)、 ISBN 978-4-7819-1403-9
22. T. Matsuno, S. Sato, H. Isobe, “Curved  $\pi$ -Receptors”, Comprehensive Supramolecular Chemistry II, 2017, vol. 3, p. 311-328, Elsevier.
23. 池本晃喜、 佐藤宗太、 磯部寛之、「芳香環で「笊」を編む -ナノメートルサイズのボウル分子のボトムアップ合成-」、 化学、 2017、 vol. 72、 No. 7、 p. 31-35 (Cover Picture に採用)
24. \*R. Iino, S. Sakakihara, Y. Matsumoto, K. Nishino, “Large Scale Femtoliter Droplet Array for Single Cell Efflux Assay of Bacteria”, *Methods in Molecular Biology*, A.



## “Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 53

January, 2018

- Yamaguchi ed., Springer 2018, 1700, 331-341, [DOI: 10.1007/978-1-4939-7454-2\\_18](https://doi.org/10.1007/978-1-4939-7454-2_18)
25. 安部聰、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、印刷中
26. \*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. SpringerNature, in press, (2018)
27. 松浦友亮、「セルフリータンパク質合成系を用いた進化分子工学技術の開発」、日本生物工学会誌、95、121-126、(2017)
28. 松浦友亮、「ネオバイオ分子創生を目指した配列空間探索」、日本生物工学会誌、94、471-472、(2016)
29. 柳川正隆、佐甲靖志  
「細胞膜受容体の1分子イメージング」、生体の科学68、386-387、(2017)
30. C. Shingyoji, “Regulation of Dynein Activity in Oscillatory Movement of Sperm Flagella”, *Muscle Contraction and Cell Motility*, H. Sugi ed., Pan Stanford Publishing, Chap. 15, pp.371 -386, (2016),  
[DOI:10.4032/9789814745178](https://doi.org/10.4032/9789814745178)
31. C. Shingyoji, “Regulation of Dynein-driven Ciliary and Flagellar Movement,” In *Dyneins - Structure, Biology and Disease* (2nd ed.), S. M. King ed., Chapter11. pp. 337-367, (Academic Press, N.Y.), (2017),  
[DOI:10.1016/B978-0-12-809471-6.00011-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809471-6.00011-5)
32. S. Fujiwara, \*K. Mizuno, “Role of Intermediate Filaments in Cell Locomotion,” In: *eLS (Encyclopedia of Life Sciences)*, A26365, John Wiley & Sons, Ltd.: Chichester, (2017),  
[DOI: 10.1002/9780470015902.a0026365](https://doi.org/10.1002/9780470015902.a0026365)
33. \*山本量一、大山倫弘、John J. Molina、Simon K. Schyder, 「ソフトマターのモデルリング：非平衡系・生物系への挑戦（特集 非平衡・非線形現象の工学的応用）」、化学工学 81、282-285、(2017)
34. 前田大光、「π電子系の合成を基盤としたイオンペア集合体の創製」 液晶（日本液晶学会設立 20 周年特集記事） 日本液晶学会 (Japan)、21 (3)、317-320、(2017)

### 受賞報告

1. 重田育照  
2017 年 10 月 21 日に International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXII) において、QSCP Promising Scientist Prize of CMOA を受賞。  
<http://www.tsukuba.ac.jp/update/awards/20171024170343.html>

(今回は平成 29 年 11 月までに頂いた情報を掲載しています。前回掲載分も新たな情報を頂いたものは掲載しています。)