

V. 生命科学研究部門

V-1. 生命機能情報分野

1. メンバー

教授	重田 育照				
助教	庄司 光男				
助教	栢沼 愛				
研究員	原田 隆平	鬼頭-西岡 宏任	佐藤 竜馬	Bui Thi Kieu My	
学生	大学院生 4 名、学類生 2 名				

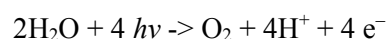
2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 29 年度は、光合成酸素発生中心 (PSII-OEC) の反応機構、宇宙空間におけるアミノ酸生成機構・アルコール分解機構、分子動力学シミュレーションによるナノキューブ形成機構、三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究、シングレットフィッション過程の理論研究、ナトリウム含有遷移金属酸化物の物性解明が大きく進展した。これらの研究では、センターのスーパーコンピュータ (HA-PACS、COMA) を利用している。センター内の共同研究として宇宙物理研究部門および高性能計算システム研究部門と連携し、Post K 萌芽的課題や CREST の研究課題を行なった。また、平成 27 年度より分子進化分野とも共同研究を続けている。

3. 研究成果

【1】 光合成酸素発生中心 (PSII-OEC) の反応機構

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに効率的に変換するシステムであり、生命が約 3 億年かけて洗練させてきた優れた化学反応系である。光合成反応は巨大な蛋白質複合体内で行われ、一連の化学反応：光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成が行われる。電子伝達を担う光化学系 II では水を分解し、酸素分子を発生する以下の反応を触媒している。



この反応は化学的に安定な水から電子を引き抜いて (酸化して) いる事から分かるように、極めて難しいため、多くの反応制御がなされている。そのため、これらの反応機構を明らかにする事は、生化学的重要性のみならず人工光合成の有益な設計指針を与えるものと期待される。我々は、量子古典混合計算法 (QM/MM) を用いて、PSII-OEC の重要な反応中間体の

電子状態、及び反応機構について理論解析を実施した。具体的には、酸素-酸素結合形成がなされる $S_3 \rightarrow S_0$ 過程における、可能な反応機構を検討し、新たな O-O 結合形成反応経路を見つけた。本反応では、Mn クラスターから Yz ラジカルへの電子移動が O-O 結合形成の反応の引き金となる。これまでの機構と区別するため、Non-adiabatic one-electron transfer (NA-OET) 機構と命名して反応機構を詳細に調べた。他にも S_2 、 S_3 状態での Mn_4Ca クラスターの特長的構造変化について電子状態から理論解析を行った。

また、 $S_4 \rightarrow S_0$ 過程の反応機構の解析及び、これまでの反応経路解析法を元に独自の自動経路探索法 (GLAS) を考案した。今後は、GLAS 法を PSII や他の酵素系に適用し、実証と改良を行っていく予定である。GLAS は Python プログラムで実装しているので、高い拡張性が有る。その為、並列化と種々のルーチン (構造最適化) の高速化を図る。京コンピュータや OFP、COMA での実行も今後実施していきたい。

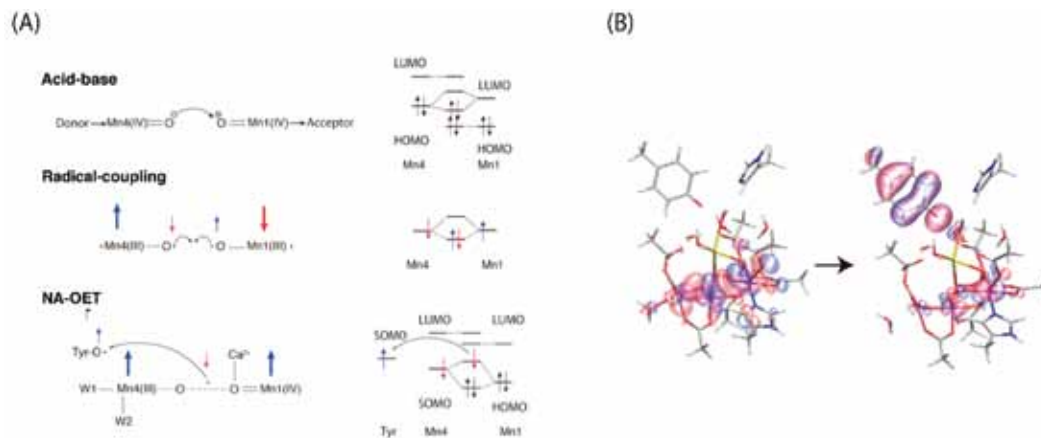


図 1 (A) PSII-OEC における 3 つの O-O 結合形成経路
(B) NA-OET 機構における β 電子の移動 (遷移状態近傍での β HOMO の変化)

【2】 宇宙空間におけるアミノ酸生成機構・アルコール分解機構

地球外環境下でのアミノ酸生成に関しては様々な反応経路が提唱されている。アミノアセトニトリルからヒダントインが生成し (Bücherer-Bergs 反応、図 2)、ヒダントインが加水分解されてグリシンが生成する反応経路を、密度汎関数法 (DFT) を用いて解析した。

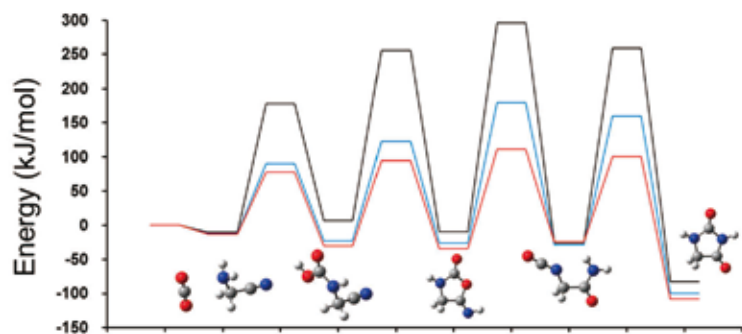


図 2 ヒダントインが形成する反応機構

アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出

されているなど、ともに宇宙化学において重要な有機分子である。各反応ステップの反応障壁を計算して反応機構の詳細を明らかにし、また、触媒となる水分子を 2 個考慮した計算を行い比較することで、本反応（特にヒダントインの形成）において、触媒となる水分子が重要であることを示した。しかし、反応障壁の高さから、この反応は星間空間では起こらず、隕石中など高温環境で起こる反応であることが示された。

また、グリシンが生成する別の機構として、星間分子である CH_3OH 、 HCN 、 NH_3 のラジカル反応による生成経路が提案されているが、その中から、 $\text{NH} + \text{CH}_2\text{COOH}$ 、 $\text{NH}_2\text{CH}_2 + \text{COOH}$ 、 $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO} + \text{OH}$ の 3 つの反応経路を DFT 法を用いて解析した。その結果、反応障壁が低い ($\leq 7.75 \text{ kJ/mol}$) 2 つの反応経路を明らかにし、星間空間のように低温環境においてもグリシン生成が起こり得ることを示した。

宇宙環境下においてラジカルが生成する主な反応機構の一つに、紫外線による光解離反応がある。星間空間において重要な有機分子の一つであるメタノール (CH_3OH) の、気相中での光解離反応の機構を明らかにするため、時間依存 DFT (TD-DFT) により、励起状態ダイナミクスシミュレーションを行った。実験的に、水素原子が解離する場合、C-H 結合の解離よりも O-H 結合の解離の方が起こり易いことが報告されているが、その理由として、第一励起状態が重要であることを示した。

【3】 分子動力学シミュレーションによるナノキューブ形成機構

生体分子に限らず有機分子も自己集合により凝集し、機能を有する分子集合体を形成する。自己集合過程において、単量体間の様々な相互作用を介して多量体を形成するそのメカニズムを解明することは、将来における機能性分子設計の貴重な設計指針となる。本年度は、有機分子が自己集合により形成する 6 量体の複合体構造であるナノキューブ (**16**)

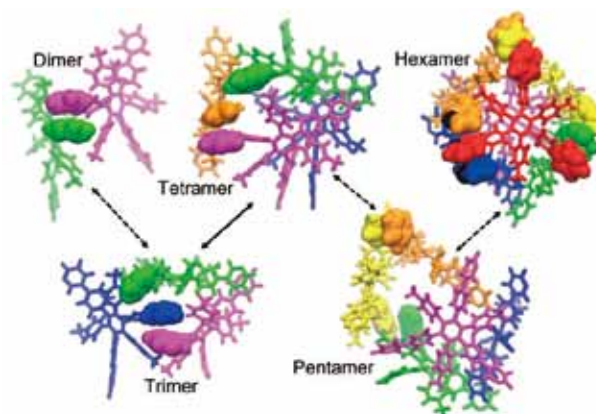


図 3 ナノキューブ (**16**) の解離過程

に着目し、その形成機構を分子動力学 (MD) シミュレーションにより解析した。計算科学的な問題として、ナノキューブが形成される時間スケールは MD シミュレーションで追跡可能な時間スケールとして遥に長時間スケールであり、通常の MD シミュレーションでは抽出することが極めて困難である。また、その形成機構は確率的であるため不確実性が常に伴うレアイベントであり、長時間の MD シミュレーションが実現したとしても、確実に抽出することが出来る保証がない。そこで、ナノキューブ形成機構を抽出するために、本来、生体分子の機能発現に関係する長時間の構造変化を抽出するために開発した構造探索法である

Structural dissimilarity sampling (SDS) を有機分子の自己集合過程に適用した。SDS は、お互いに構造類似性が低い初期構造を選択し、短時間の MD シミュレーションで構造探索を繰り返していくことで可能な限り重複を避けた効率的な構造探索を実現し、生体分子のレアイベントを抽出する目的で開発された。本研究では、ナノキューブ (6 量体) を初期構造とし、探索構造を高次元空間における高次元ベクトルとみなし、探索構造間の内積を定義することで構造類似性を表現した。具体的には、探索構造間の内積が小さい初期構造を再選択し、短時間 MD シミュレーションをリスタートしていくことで、ナノキューブ構造を逐次的に解離させることに成功した。具体的には、サイクルあたり 25 個の初期構造を探索構造間の内積を参照にして再選択し、初期構造あたり 100ps の短時間 MD シミュレーションをリスタートさせることで構造探索を繰り返した。

図 3 に SDS を適用することで得られたナノキューブの解離過程を示す。中間体状態として、5 量体、4 量体、3 量体、2 量体構造が存在し、各々の中間体構造において芳香族環のスタッキングやメチル基間の疎水性相互作用を介して準安定状態として安定的に存在していることが明らかになった。今後は、本研究により得られた詳細な解離機構の知見を機能性有機分子設計へ応用していく予定である。

【4】 三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究

低エネルギーの光を高エネルギーの光に変換する技術としてフォトン・アップコンバージョン (UC) が知られている。近年、三重項-三重項消滅 (TTA) を利用した UC に注目が集まっている。現在、太陽光を利用した技術は多く開発されているがそれらの技術は太陽光に多く含まれている赤外・近赤外領域の光を利用できていない。そこで TTA-UC を用いて赤外・近赤外領域の光を可視・紫外領域の光へ変換することでこれまで以上の反応効率を実現できると期待されている。

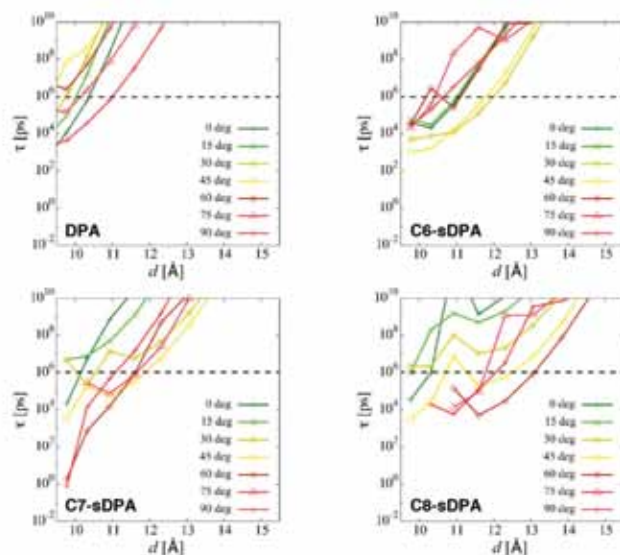


図 4 DPA および C_n -sDPAs の TTA における電子移動時間

本年度は、溶液系における 9,10-ジフェニルアントラセン (DPA) およびその誘導体 (C_n -sDPAs) に対して分子動力学 (MD) 計算および量子化学計算を用いてその反応機構を調べた。TTA は二つの三重項状態の分子が接近した際にそれぞれの分子から電子が移動することで反応が進行する。本研究では、それぞれの分子の二量体モデルに対してフラグメント分子軌道

(FMO) 法および FMO-linear combination of molecular orbitals (FMO-LCMO) 法を用いて電子の移動速度を算出した (図 4)。その結果、従来用いられている DPA よりも新たに提案された Cn-sDPAs のほうが電子移動時間が短いことがわかった。特に分子間距離が離れていてもある程度短い時間で電子が移動できることを示しており、この結果は反応効率の上昇を示唆している。また接近する際の分子配向の依存性についても DPA に比べて Cn-sDPAs は広い範囲で電子移動時間が短いこともわかった。実際、実験によって C7-sDPA が DPA よりも反応効率が高いことが報告されている。今後は溶液系では実用化することが困難であることから固体系の適用が考えられており、固体系における反応機構の解析および高効率を実現できる新たな誘導体を提案する予定である。

【5】 シングレットフィッシュン過程の理論研究

シングレットフィッシュン (SF) とは、一重項励起子が 2 つの三重項励起子に分裂する現象で、アセン分子結晶で観測される。この現象を利用すると、単一接合太陽電池の持つ約 34% の太陽エネルギー利用効率限界を、最大で約 46% まで改善できる可能性が理論的に示されている。そこで、より良いエネルギー変換効率を持つ太陽電池を分子スケールで設計するためには、SF の微視的メカニズムを理解することが重要になる。

本研究では、SF 反応速度の測定値と分子結晶構造データが存在する、9 種類のテトラセン/ペンタセンアトトラセン誘導体の分子結晶中の

SF 反応に対して、準透熱波動関数に基づくモデルハミルトニアンを構築し、その微視的メカニズムを第一原理的に調べた。代表的な透熱基底変換法として Nakamura & Truhlar の”fourfold-way”法があるが、今回新たに ORMAS-CI 計算を利用した、より計算コストの低い透熱基底変換法を提案し、両者を比較・検討した。

まず、電荷移動励起状態 (CT) をヴァーチャルに介した超交換機構によって生成される、局在一重項励起状態 (FE) ともつれ合った三重項励起状態 (TT) の間の電子的相互作用 (SF 相互作用) を、完全活性空間 (CAS) -SCF レベルで計算した。その結果、SF 相互作用の計算値は、SF 反応速度の実験値の傾向を再現した。また、適用した二種類の透熱基底変換法は、ほぼ同様の結果を生み出した。次に、動的電子相関の影響を調べるために、擬縮退摂動理論 (XMCQDPT2) レベルで SF 相互作用を計算した。XMCQDPT2 は、CASSCF が CT 状態のエネルギーレベルを過少評価した場合に、結果を大きく改善することが分かった。

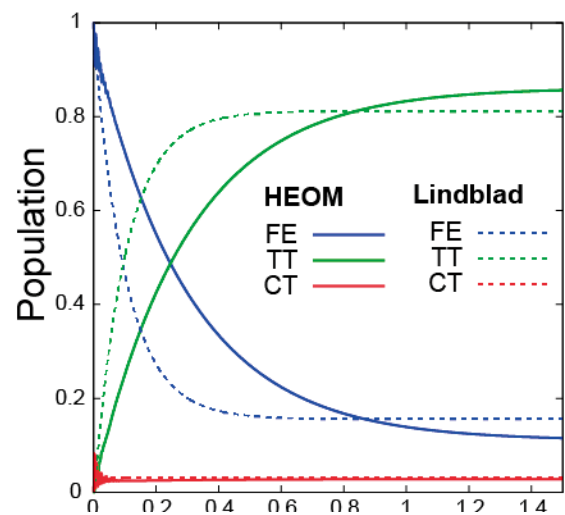


図 5 量子マスター方程式を用いた、ペンタセン二量体 SF の Population ダイナミクス

最後に構築したモデルハミルトニアンに量子マスター方程式を適用して、量子散逸効果を考慮した電子状態ダイナミクスシミュレーションを実行した。図 5 は、ペンタセン二量体に対して、マルコフ近似を用いた Lindblad マスター方程式と、非マルコフ効果を考慮した階層方程式 (HEOM) を用いた計算結果である。CT 状態をヴァーチャルに使うため、CT 状態に Population を持たず、FE/TT の Population が単一指数関数的に減少/増大する。また図 5 から、マルコフ近似を用いた Lindblad マスター方程式が、HEOM による SF 速度の見積もり約 2.5ps^{-1} を、 6.7ps^{-1} と過大評価することも分かる。

【6】 ナトリウム含有遷移金属酸化物の物性解析

電気自動車による長距離移動や、再生可能エネルギー源のメガワット貯蔵などの技術を確認するためには、高性能なバッテリーが必要となる。従来の Li イオン電荷キャリアに関しては、リチウム資源が希少かつ地球全体に不均一に分布することから、将来的に厳しい制約を受けることが考えられる。一方、Li の代替として Na イオンを用いることも有望であるが、多くの課題が山積している。例えば、Na は Li に比べてイオン半径が大きくイオン化ポテンシャルが小さいため、Na 系陰極ではエネルギー密度が低下する。したがって、Na イオンベースの陰極を Li レベルにするには、あらゆる性能向上メカニズムについて注意深く調整する必要がある。

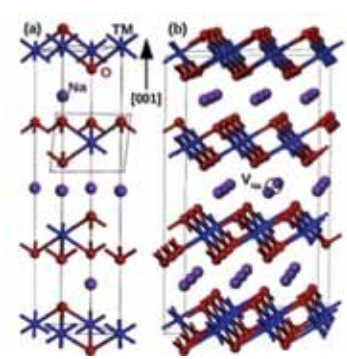


図 6 NaTMO₃ の構造

本研究では、右図の構造を持つ第 4 周期から第 5 周期の遷移金属 (TM) を含むナトリウム含有遷移金属酸化物 (NaTMO₃) の密度汎関数計算法によるバンド計算を行い、酸化状態と還元状態のエネルギー差から電極電位を評価した。計算結果より、測定結果のある解に関してはその実測値をよく再現していることを示した。また、TM-O 結合のイオン性よりもむしろ、酸化に伴う TM 周りの酸素配位の歪みとそれに付随する磁気的な交換相互作用が、陰極電位を支配していることを明らかにした。本研究を通じて、従来のイオン化ポテンシャルに基づく物質設計指針に代わる、遷移金属の電子配置とその変化に基づく設計指針を提案した。

4. 教育

【卒業研究発表】

石川航平、「Cytochrome *c* dimer の構造安定性と物性に関する理論的研究」

佐藤雄太、「束縛条件下での構造最適化」

【修士課程修了】

喜屋武茜、「テルペンの生成機構の理論研究：ワインラクトン生成の立体選択性」

【博士課程修了】

佐藤皓允、「First-Principle Studies on the Origin of Amino Acid Chirality in Interstellar Space」

【講義】

庄司光男、計算物理学 2、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、計算物理学 3、物理学類専門科目、秋 ABC

重田育照・庄司光男、生物物理学 I、物理学類専門科目、秋 AB

重田育照、生物物理科学、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、物性理論 I、物理学専攻専門科目、春 ABC

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 原田隆平、第 67 回日本化学会進歩賞（2018 年 3 月 21 日）
2. Y. Shigeta, "22nd QSCP (*Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology*) Promising Scientist Award", Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée (CMOA) (2017). Oct. 19th 2017.
3. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, *4th Biophysics and Physicobiology Editors' Choice Award*. "Theoretical analyses on a flipping mechanism of UV-induced DNA damage", *Biophysics and Physicobiology* **13**, 311-319 (2016), The Biophysical Society of Japan (2017). 19th Jul. 2017

外部資金

【研究代表者】

1. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究、重田育照（代表者）（平成 26～30 年度）
「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
2. 若手研究（A）、庄司光男（研究代表者）（平成 29 年～31 年度）「光化学系 II 酸素発生中心における水分解反応の全反応経路解明」
3. 若手研究（A）、原田隆平（研究代表者）（平成 28 年～30 年度）「G タンパク質共役受容体におけるシグナル伝達機構の解明」

【分担研究者】

1. Post K 重点課題 7A、重田育照（代表者：押山淳 教授）（平成 28～31 年度）「高機能半導体デバイス」
2. 基盤研究（B）、庄司 光男（代表者：岡島 俊英）（平成 28～31 年度）「酵素活性中心の構造変化とゆらぎにリンクする触媒反応遷移状態の制御機構」
3. 挑戦的萌芽研究、庄司 光男（代表者：相川 祐理）（平成 28～31 年度）「計算科

学によるアストロバイオロジーへの理論的挑戦」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. R. Harada, Y. Shigeta, "Self-Avoiding Conformational Sampling (SACS) Based on Histories of Past Conformational Searches", *Journal of Chemical Information and Modeling* **57**, 3070-3078 (2017). DOI: 10.1021/acs.jcim.7b00573.
2. M. Hada, S. Saito, S. Tanaka, R. Sato, M. Yoshimura, K. Mouri, K. Matsuo, M. Hara, Y. Hayashi, Y. Shigeta, S. Yamaguchi, K. Onda, R. J. D. Miller, "Structural monitoring of the onset of excited-state aromaticity in a liquid crystal phase", *Journal of the American Chemical Society* **139**, 15792–15800 (2017). DOI: 10.1021/jacs.7b08021
3. Y. Sasano, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda, "H-aggregated π -systems based on disulfide-linked dimers of dipyrrolyldiketone boron complexes", *The Journal of Organic Chemistry* **82**, 11166–11172 (2017). DOI: 10.1021/acs.joc.7b02185
4. M. Kayanuma, K. Kidachi, M. Shoji, Y. Komatsu, A. Sato, Y. Shigeta, Y. Aikawa, M. Umemura, "A theoretical study of the formation of glycine via hydantoin intermediate in outer space environment", *Chemical Physics Letters* **687**, 178-183 (2017). DOI: 10.1016/j.cplett.2017.09.016
5. T. Matsui, Y. Shigeta, K. Morihashi, "Assessment of Methodology and Chemical Group Dependences in the calculation of the pK_a Value and Gibbs Energy of a Proton", *Journal of Chemical Theory and Computation* **13**, 4791-4803 (2017). DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00587
6. H. Konishi, M. Matsubara, K. Mori, T. Tokiwa, S. Arulmozhiraja, Y. Yamamoto, Y. Ishikawa, H. Hashimoto, Y. Shigeta, H. Tokiwa, K. Manabe, "Controlling CO Generation: Mechanistic Insight into Weak-Base-Catalyzed Generation of Carbon Monoxide from Phenyl Formate and Its Application to Catalytic External-CO-Free Carbonylation at Room Temperature", *Advanced Synthesis & Catalysis*, **359**, 3592-3601(2017). DOI: 10.1002/adsc.201700751
7. R. Harada, Y. Shigeta, "An Assessment of Optimal Time Scale of Conformational Resampling in Parallel Cascade Molecular Dynamics", *Molecular Simulation* **44**, 206-212 (2017). DOI: 10.1080/08927022.2017.1362696
8. R. Harada, Y. Shigeta, "Dynamic Specification of Initial Structures in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) Efficiently Promotes Biologically Relevant Rare Events", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **90**, 1236-1243(2017). DOI: 10.1246/bcsj.20170177

9. R. Harada, Y. Shigeta, "Temperature-shuffled parallel cascade selection molecular dynamics accelerates the structural transitions of proteins", *Journal of Computational Chemistry (Rapid Communication)* **38**, 2671–2674 (2017). DOI: 10.1002/jcc.25060
10. H. Yotsuji, K. Higashiguchi, R. Sato, Y. Shigeta, K. Matsuda, "Phototransformative Supramolecular Assembly of Amphiphilic Diarylethenes Realized by the Combination of Photochromism and Lower Critical Solution Temperature Behavior", *Chemistry - A European Journal*, **23**, 15059-15066(2017). DOI: 10.1002/chem.201702202.
11. R. Harada, Y. Shigeta, "Structural Dissimilarity Sampling with Dynamically Self-Guiding Selection", *Journal of Computational Chemistry* **38**, 1921-1929(2017). DOI: 10.1002/jcc.24837
12. 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", *Molecular Simulation* **43** (13-16), 1260-1268(2017). DOI: 10.1080/08927022.2017.1315770
13. Y. Kitagawa, M. Asaoka, Y. Natori, K. Miyagi, R. Teramoto, T. Matsui, Y. Shigeta, M. Okumura, M. Nakano, "Theoretical study on relationship between spin structure and electron conductivity of one-dimensional tri-nickel (II) complex", *Polyhedron* **136**, 125-131(2017). DOI: 10.1016/j.poly.2017.02.020
14. Y. Ujiie, W. Tanaka, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, T. Murakawa, T. Ishida, Y. Shigeta, H. Hayashi, "Molecular Mechanism of the Reaction Specificity in Threonine Synthase: Importance of the Substrate Conformations", *Journal of Physical Chemistry B* **121**, 5536-5543(2017). DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b02932
15. 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*", *Journal of Structural Biology* **198**, 65-73 (2017). DOI: 10.1016/j.jsb.2017.04.008
16. Y. Kobayashi, H. Okajima, H. Sotome, T. Yanai, K. Mutoh, Y. Yoneda, Y. Shigeta, A. Sakamoto, H. Miyasaka, J. Abe, "Direct Observation of the Ultrafast Evolution of Open-Shell Biradical in Photochromic Radical Dimer", *Journal of the American Chemical Society* **139**, 6382-6389 (2017). DOI: 10.1021/jacs.7b01598
17. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, T. Yanai, Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Process of 9,10-diphenylanthracene in Solution", *Chemistry Letters* **46**, 873-875 (2017). DOI: 10.1246/cl.170161

18. 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)?", *Chemistry Letters* **46**, 862-865 (2017). DOI: 10.1246/cl.170207
19. R. Harada, Y. Shigeta, "Efficient conformational search based on Structural Dissimilarity Sampling: Applications to reproductions of structural transitions on Maltodextrin Binding Protein", *Journal of Chemical Theory and Computation* **13**, 1411-1423(2017). DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01112
20. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda, "Cooperatively Interlocked [2+1]-Type π -System-Anion Complexes", *Chemistry A European Journal*, **23**, 4160–4168 (2017). DOI: 10.1002/chem.201605765
21. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Common folding processes of mini proteins: Partial formations of secondary structures initiate the immediate protein folding", *Journal of Computational Chemistry* **38 (Front Cover)**, 790-797(2017). DOI: 10.1002/jcc.24748
22. M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, Y. Shigeta, M. Suga, F. Akita, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM calculations of the CaMn_4O_5 cluster in the S_3 state of the oxygen evolving complex of photosystem II. Comparison between water-inserted and no water-inserted structures", *Faraday Discussions* **198**, 83-106 (2017). DOI: 10.1039/C6FD00230G
23. Y. Abe, M. Shoji, Y. Nishiya, H. Aiba, T. Kishimoto, K. Kitaura, "Reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods", *Physical Chemistry Chemical Physics* **19**, 9811-9822 (2017). DOI: 10.1039/C6CP08172J.
24. H. Kitoh-Nishioka, K. Welke, Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle "Multiscale Simulations on Charge Transport in Covalent Organic Frameworks Including Dynamics of Transfer Integrals from FMO-DFTB/LCMO", *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**, 17712-17726 (2017). DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05779

B) 査読無し論文

1. Y. Imai, T. Yamamoto, Y. Okano, R. Sato, Y. Shigeta, "Molecular Dynamics Simulation of the Nano-scale Solutal Marangoni Convection", *Asean Journal of Chemical Engineering* **17**, 29-36 (2017).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, "QM/MM Studies of the Reaction Mechanisms of Metalloenzymes", *International Congress on Pure & Applied Chemistry 2018 (ICPAC2018)*, Mar. 7th-10th 2018, Siem Reap, Cambodia.
2. Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution", 8th *Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8)*, Dec. 15th-17th 2017, Mumbai, India.
3. Y. Shigeta, "An Enhanced Sampling Method for Searching Conformational Changes of Proteins and Supramolecules", 22nd *International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XXII)*, Oct.16th-24th 2017 Hunan Province, P.R. China.
4. Y. Shigeta, "Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution", *The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science*, Aug. 8th-11th 2017, Kuala Lumpur, Malaysia.
5. Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions", 10th *China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture*, May 14th-17th 2017, Wuhan, China.

B) 一般講演

1. R. Sato, H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Processes of 9,10-diphenylanthracene and derivatives in solution" (**Oral**), 28th *International Conference on Photochemistry*, July 16th-21st, Strasbourg Convention + Exhibition Centre, Strasbourg, France.
2. Y. Shigeta, K. Okuno, R. Kishi, M. Nakano, "Theoretical Studies on Nonlinear Optical and Solvatochromism Switches of Diarylethenes" (**Oral**), 12th *Phenics International Network Symposium*, University of Strasbourg, Strasbourg, France.
3. M. Shoji, Y. Kitazawa, A. Sato, Y. Shigeta, M. Umemura, "A quantum chemical study of the glycine formation reactions in interstellar medium" (**Oral**), *AstroBiology Center international workshop*, Mar. 21st-23rd 2017, Hiroshima University, Hiroshima, Japan.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. Y. Shigeta, "Computational Studies on Tautomerism in Protein Environment", 第 55 回生物物理学会シンポジウム「タンパク質科学におけるケトエノール異性」、September 19th-21st 2017、熊本大学黒髭キャンパス、熊本。

2. 庄司光男, "星間空間におけるアミノ酸生成と光不斉化についての量子化学的探究", 天体形成論 ~過去・現在・未来~, Sep. 21st 2017, 筑波大学大学会館、つくば.
3. M. Shoji, S. Yamasaki, M. Kayanuma, Y. Shigeta, "Reaction mechanisms of iron-containing proteins elucidated using QM/MM calculations", *The 55th annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Sep. 19th 2017, Kumamoto Univ., Kumamoto, Japan.
4. 原田隆平, "生物学的レアイベントを効率的に再現・予測する構造サンプリング手法の開発", 物性研究所スパコン共同利用 CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」Apr. 4th 2017, 東京大学, Kashiwa, Japan.
5. 原田隆平, "生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発", 新学術領域「柔らかな分子系」ワークショップ「若手研究者が描く分子理論の未来」Sep. 14th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
6. 原田隆平, "生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発", 第 3 回近電セミナー, Dec. 13th 2017, 電気通信大, Fuchu, Japan.
7. 鬼頭(西岡)宏任, "一重項励起子分裂の量子化学計算", 研究会「凝縮系の理論化学」, Mar. 13th 2018, 沖縄県青年会館, Naha, Japan.

B) その他の発表

1. Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions: Application to conformational changes of GDP bound SaFitZ" (**Poster**), *Swedish-Japanese Workshop on Nano-Structure Science by Novel Light Sources*, Oct. 2nd-3rd Lund University, Lund, Sweden.
2. Bui Thi Kieu My, Y. Shigeta, J. Iwata, A. Oshiyama, "RSDFTによるGaN表面反応解析、およびRSCPMのGPU実装" (**Oral**), 第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題 (7)) 研究会, July 11th-12th 2017, 東京大学, Tokyo, Japan.
3. Y. Shigeta, "理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御" (**Oral, Poster**), 新学術領域研究「高次複合光応答」第2回領域会議, May 19th-20th 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.
4. Y. Shigeta, "実空間密度汎関数法に基づくCar-Parrinello分子動力学法のGPGPU実装" (**Poster**), 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」, Apr. 3rd-4th 2017, 東京大学, Kashiwa, Japan.
5. Y. Shigeta, "理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御" (**Oral, Poster**), 新学術領域研究「高次複合光応答」第5回公開シンポジウム, Jan. 20th-21st 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.

6. 庄司光男、村川武志、岡島俊英、重田育照、”銅含有アミン酸化酵素における触媒反応中のプロトン化状態についての理論的解明” (**Poster**), 第 17 回日本蛋白質科学会年会, Jun. 22nd 2017, 仙台国際センター, 仙台.
7. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM study on the S1 state structures of the oxygen-evolving complex in photosystem II" (**Poster**), *The 67th Japan Society of Coordination Chemistry Symposium*, Sep. 18th 2017, Sapporo Hokkaido, Japan.
8. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "QM/MM study on the O₂ release mechanism of the oxygen-evolving complex in photosystem II" (**Oral**), *The 55th annual meeting of the biophysical Society of Japan*, Sep. 20th 2017, Kumamoto Univ., Kumamoto, Japan.
9. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "QM/MM study on a S₄ -> S₀ reaction of the Oxygen Evolving Complex in Photosystem II"(**Poster**), *Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017*, Oct. 19th 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
10. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, "Surface Hopping Simulation on the Photodissociation of Methanol"(**Poster**), CPMD2017 Workshop, 2017. 10., Tsukuba (Japan),
11. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta, "Theoretical study on the photodissociation of methanol in the interstellar medium"(**Poster**), *28th International Conference on Photochemistry*, July 16th-21st, Strasbourg Convention + Exhibition Centre, Strasbourg, France.
12. 原田隆平、重田育照、"生物学的レイアイイベントを再現/予測するタンパク質構造サンプリング手法の開発" (**Poster**), 第17回日本蛋白質科学会年会, Jun. 22nd 2017, 仙台国際センター, Sendai, Japan.
13. 佐藤竜馬、重田育照、"Theoretical Analyses on Triplet-Triplet Annihilation Based Photon Upconversion Mechanism for Solution and Crystal States" (**Poster**)、第 5 回分子システム科学国際シンポジウム、Dec. 5th-6th 2017, 九州大学, Fukuoka, Japan.
14. 佐藤竜馬、原田隆平、重田育照、"光回復酵素と DASH 型クリプトクロムにおける紫外線損傷二本鎖 DNA の結合に寄与する因子の特定"(**Oral**), 第 55 回日本生物物理学会年会, Sep. 19th-21st 2017, 熊本大学, Kumamoto, Japan.
15. 佐藤竜馬、鬼頭-西岡宏任、鎌田賢司、柳井 毅、重田育照、"三重項-三重項消光によるフォトン・アップコンバージョンの高効率化に向けた反応機構の理論的解析" (**Oral**), 第 11 回分子科学討論会, Sep. 15th-18th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.

16. 佐藤竜馬、重田育照、"9,10-ジフェニルアントラセン誘導体の三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンに関する理論的研究"**(Poster)**、第3回「高次複合光応答」若手の会、Sep. 11th-12th、晴海グランドホテル, Tokyo, Japan.
17. 佐藤竜馬、鬼頭-西岡宏任、鎌田賢司、溝黒登志子、柳井 毅、小林健二、重田育照、"9,10-ジフェニルアントラセン誘導体の三重項-三重項消光アップコンバージョン過程に対する理論的研究" **(Oral)**、2017 年光化学討論会、Sep. 4th-6th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
18. 佐藤竜馬、重田育照、「三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構の理論的解析」**(Oral, Poster)**、新学術領域研究「高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築」第2回領域会議・第6回若手セミナー, May 19th-20th 2017, 大阪大学, Toyonaka, Japan.
19. Kieu My Bui, Junichi Iwata, Atsushi Oshiyama, Yasuteru Shigeta; "First-principles analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface"**(Poster)**, *The 20th Asian workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, Oct. 30th – Nov. 1st, Nanjing, China.
20. Kieu My Bui, Junichi Iwata, Atsushi Oshiyama, Yasuteru Shigeta; "First-principles analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface"**(Poster)**, *The 3rd CDMSI Symposium: Creation of new functional Devices and high-performance Materials to Support next-generation Industries (CDMSI)*, Dec. 5th-6th, 2017, Tokyo, Japan.
21. 鬼頭宏任, “生体系と有機半導体における電荷移動現象の量子化学計算とシミュレーション”, 神戸大学大学院システム情報学研究科セミナー, Dec. 27th 2017, 神戸大学.
22. 鬼頭宏任, “シングレットフィッションの理論解析手法の開発”**(Oral)**, 第一回プレ戦略研究会「次世代物質・デバイス戦略開発拠点」, Dec. 11th 2017, 筑波大学.
23. 鬼頭(西岡) 宏任, 佐藤竜馬, 重田育照, “CASSCF法を用いた一重項励起子分裂の電子相互作用計算”**(Oral)**, 第11回分子科学討論会, Sep. 15th-18th 2017, 東北大学 川内北キャンパス.
24. Hirotaka Kitoh-Nishioka, Kai Welke, Yosio Nishimoto, Dmitri G. Fedorov, and Stephan Irle, "Multiscale Simulations on Charge Transport in Covalent Organic Frameworks" **(Poster)**, The 58th Sanibel Symposium, Feb. 18th-23rd 2018, St. Simons Island, Georgia, USA.
25. Hirotaka Kitoh-Nishioka, Ryuma Sato, and Yasuteru Shigeta, “Study on Singlet Fission Using Model Hamiltonian Based on Quasi-Adiabatic CASSCF/MCQDPT2 Wave functions” **(Poster)**, 2018 Joint Symposium on Energy Materials Science and Technology (Workshop of Pre-Strategic Initiatives) Mar. 8th-9th 2018, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan.

26. S. Yamasaki, M. Shoji, Y. Shigeta, "A QM/MM study on the oxygen-binding structure of alternative oxidase"(**Poster**), CPMD2017, Oct. 18th-20th 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
27. S. Yamasaki, M. Shoji, Y. Shigeta, "QM/MM study on the oxygen-binding structure of trypanosome alternative oxidase (TAO)"(**Poster**), TGSW-IWP2017, Sep. 25th-27th 2017, Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan.
28. 山崎笙太郎、庄司光男、重田育照、"シアン耐性酸化酵素における酸素分子結合構造についての理論的研究"(**Oral**), 第11回分子科学討論会, Sep. 15th-18th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.
29. 木間塚政人、庄司光男、重田育照、"分子動力学法を用いた不凍タンパク質と水分子間の相互作用に関する理論研究"(**Poster**), 第11回分子科学討論会、Sep. 15th-18th, 東北大学, Sendai, Japan
30. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on Interaction of Anti-Freeze Protein (AFP) with Water Molecules"(**Poster**), TGSW2017, Sep. 20th-22nd, EPOCAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan
31. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on the effects of Anti-Freeze Protein (AFP) on ice growth"(**Poster**), CPMD2017, Oct. 18th-20th, EPOCAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan
32. Masato Kimatsuka, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on growth of ice crystal bound by Anti-Freeze Protein"(**Poster**), APCTCC8, Dec. 15th-17th, IIT, Mumbai, India
33. 喜屋武茜、栢沼愛、庄司光男、重田育照、"ワインラクトンの立体選択的生成機構の理論研究"(**Poster**), 第31回分子シミュレーション討論会、Nov. 29th-Dec. 1st, 金沢商工会議所, Kanazawa, Japan
34. 常盤恭樹、庄司光男、柴田直樹、樋口芳樹、片岡邦重、重田育照、美齊津文典、"QM/MM 法によるビリルビンオキシダーゼにおける構造変化と酸化還元電位に関する理論的研究" (**Oral**)、第 7 回日本生物物理学会関東支部会, Mar. 13th-14th 2018, 東京大学駒場, Tokyo, Japan.
35. Takaki Tokiwa, Mitsuo Shoji, Naoki Shibata, Yoshiki Higuchi, Kunishige Kataoka, Yasuteru Shigeta, and Fuminori Misaizu, "A Theoretical Study on the T1Cu Site in Bilirubin Oxidase (BOD): Relation between Structural Changes and Redox Potentials" (**Poster**), The 58th Sanibel Symposium, Feb. 18th-23rd 2018, St. Simons Island, Georgia, USA.
36. Takaki Tokiwa, Mitsuo Shoji, Naoki Shibata, Yoshiki Higuchi, Kunishige Kataoka, Yasuteru Shigeta, and Fuminori Misaizu, "QM/MM Study on the T1 Cu site structures and the Redox

Potentials in Bilirubin Oxidase (BOD)" (**Poster**), CPMD2017 Workshop, Oct. 18th-20th 2017, EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan.

37. 常盤恭樹、庄司光男、柴田直樹、樋口芳樹、片岡邦重、重田育照、美齊津文典、"ビリルビンオキシダーゼの構造と酸化還元電位に関する理論的研究" (**Oral**), 第11回分子科学討論会, Sep. 15th-18th 2017, 東北大学, Sendai, Japan.

(4) 著書、解説記事等

1. 岩田潤一, 松下雄一郎, 澤田啓介, 重田育照, 押山 淳、「実空間差分法による大規模計算：半導体表面・ナノ構造への応用」、固体物理（特集号）**52**, 581-591 (**invited**) (2017).
2. T. Baba, K. Kamiya, Y. Shigeta, "Integrated Computational Studies on Mutational Effects of A Nylon-degrading Enzyme", *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology: Advances in Concepts and Applications*, Progress in Theoretical Chemistry and Physics Vol. **30**, 317-330, Springer (2017). DOI:10.1007/978-3-319-50255-7_19.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）
宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する研究を物性・宇宙分野と連携して進展させた。
2. 生命情報・分子進化分野間連携
伸長因子 EF-1 α の立体構造に関する理論的研究を分子進化分野と連携して進展させた。
3. 生命-高性能計算システム研究部門連携
フラグメント分子軌道法に hybrid DFT の GPU 版を実装し、高性能計算システム研究部門と連携してプログラムの GPU 化対応を進展させた。

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 研究会「レア・イベントの計算科学」、志賀基之、藤崎弘士、重田育照、森下徹也、君塚肇、Aug. 28th-30th 2017, 伊豆山研修センター。

9. 管理・運営

重田育照

物理学類学務委員、広報委員、カリキュラム委員、FD 委員、全学教育会議委員
計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、生命科学研究部門長

10. 社会貢献・国際貢献

集中講義・海外の大学におけるセミナー

1. 重田育照、「反応量子化学」集中講義、2017 Dec. 10、立教大学大学院理学研究科.
2. 重田育照、「計算化学」集中講義、Nov. 27th-28th 2017、大阪市立大学大学院工学研究科.
3. Y. Shigeta, "A Simple Conformational Sampling Algorithm for Understanding Functions of Biomolecules", 11th Sep. 2017, Institute of Chemistry, Slovakia Academy of Science, Slovakia.
4. Y. Shigeta, "A Simple Conformational Sampling Algorithm for Understanding Functions of Biomolecules", Central European Institute of Technology (CEITEC), 8th Sep. 2017, Masaryk University, Czech.
5. 重田育照、「生物物理学」集中講義、Sep 1st 2017、秋田大学大学院工学研究科.
6. 重田育照、「計算医工学」集中講義、August 3rd-4th, 2017、広島市立大学大学院情報科学研究科.
7. 重田育照、"効率的な構造サンプリング手法の開発と生命機能の解析"、27th 2017、千葉大学理学研究科. 「物性理論」集中講義、June 26th-27th 2017、千葉大学理学研究科.
8. Y. Shigeta, "Efficient Sampling Methods for Rare Event: Applications to Chemistry & Structural Biology", 18th April 2017, Department of Chemistry, Southern California University, USA.

11. その他

なし

V-2. 分子進化分野

1. メンバー

教授	稲垣 祐司
研究員	石谷 佳之
教授	橋本 哲男（共同研究員・生命環境系）
特任助教	湯山 育子（生命環境系）
研究員	矢崎 裕規（生命環境系）
学生	大学院生 4 名（後期課程在学 2 名、前期課程在学 2 名）、学類生 2 名

2. 概要

分子進化分野では、真核生物の主要グループ間の系統関係解明に向け、主に 3 つの「柱」を設定し研究を進めている。

【1】新奇真核微生物の系統的位置の検討.....真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化し、100 以上の遺伝子データから構成される大規模分子系統解析によりその系統的位置を確定する。

【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析.....真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養とトランスクリプトームおよびゲノムデータの取得を進めている。これら大規模配列データを基に、核ゲノム解析、オルガネラゲノム解析等を行う。

【3】分子系統解析の方法論研究.....分子系統解析においては、解析する配列データの特徴、使用する解析法・配列進化モデルなどにより、系統推定に偏りが生じることが知られている。これまでの方法論は単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。また、現状では超並列計算機上で効率よく作動する解析プログラムも十分に普及しているとは言えない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究と系統解析プログラムの並列化を行っている。

3. 研究成果

【1】 新奇真核微生物の系統的位置の検討

H25 年度に、我々の研究グループが単離・同定し、正式に記載した *Tsukubamonas globosa* の大規模分子系統解析とミトコンドリアゲノムの完全解読結果を *Genome Biol Evol* 誌 (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315) に、H26 年度に *Palpitomonas bilix* の大規模分子系統解析の結果を *Sci Rep* 誌に (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641)、H28 年度には大規模分子系統解析結果を基盤としてホヤ病原性寄生原虫 *Azumiobodo hoyamushi* をふくむキネトプラスト類中の生活様式の進化を発表した (Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Syst* 92:35-42)。H29 年度には、嫌気性・微好気性真核微生物から構成されるフォルニカータ生物群内部の系統関係を 159 遺伝子データの系統解析により頑健に再構築するとともに、この生物群のミトコンドリア縮退過程を議論した論文を *Nat Ecol Evol* 誌に発表した (Leger et al. 2017 *Nat Ecol Evol* 1:0092)。さらに、系統的帰属不明な真核微生物 *Rigifila ramosa* については 351 遺伝子データに基づく系統解析を行い、その結果を *Genome Biol Evol* 誌に発表した (Brown et al. 2018 *Genome Biol Evol* 10:427-433)。今年度の報告では、主に *Rigifila* の系統的位置に関する報告を行う。また *Microheliella maris* および SRT605 株の系統的位置については継続して解析を進めているが、157 遺伝子データに基づく系統解析の結果を示し、結果と今後の解析における問題点について議論する。系統的位置が確定した真核微生物 PAP020 株 (H27 年度年次報告書参照) と SRT308 株 (H28 年度年次報告書参照) については現在投稿論文の取りまとめ中である。

***Rigifila* はディフェレリア類とマンタモナス類と単系統群を構成する**

我々はこれまでの研究でその系統的位置を確定できなかった複数の真核微生物のうちコロディクチオン類、リジフィラ類 *Rigifila ramosa*、マンタモナス類 *Mantamonas plastica* について、大規模トランスクリプトームデータを取得し、それらのデータを含む大規模系統解析を行った。351 タンパク質データに基づく系統解析の結果、上記 3 系統は極めて強い統計的支持のもと単系統群 (CRuMs と命名) を形成し、我々はこの単系統群をこれまで認識されていなかった真核生物主要系統群の 1 つであると位置付けた (図 1: 破線囲み)。先行研究では、後生動物と菌類 (とその近縁な真核微生物) から構成されるオピストコンタ類 Opisthokonta は、ブレビアータ類 Breviatea とアプソモナス類 Apusomonada とともにアモルフィア群 Amorphea を形成すると提唱されている。これまでアンキロモナス類はアモルフィア群に最も近縁であると考えられてきたが、*R. ramosa* を解析データに加えた 351 タンパク質系統解析の結果は、アンキロモナス類ではなく CRuMs がアモルフィア群に最も近縁な系統であることを頑健に示した。これらの解析結果を統合すると、CRuMs、アンキロモナス類、マラウィモナス類は、それぞれ真核生物進化の初期段階で分岐した系統群のメンバーであると考えられる (図 1)。

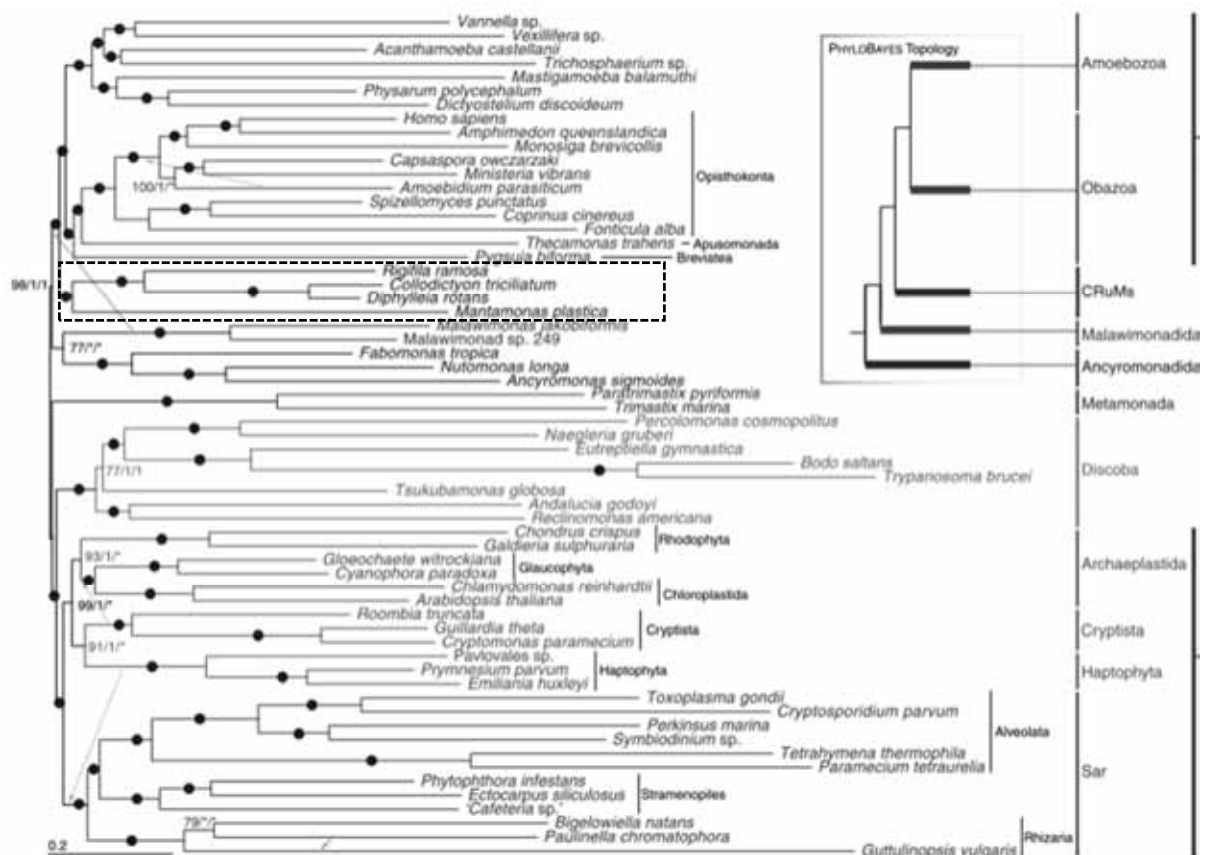


図 1. 351 遺伝子データに基づき推測された真核生物系統 (Brown et al. 2018). *Rigidia ramosa* はマンタモナス類 (*Mantamonas plastica*) とディフェレリア類 (*Collodictyon trilineatum* & *Diphyleia rotans*) とともに頑健な単系統群 (CRuMs) を形成する。系統樹中の●は、最尤法ブートストラップ解析で 100%かつベイズ法の事後確率 1.0 で支持されたことを示す。

Microheliella maris および SRT605 株の系統的位置についての中間報告

Microheliella maris は海産の“太陽虫”であり、形態的に有中心粒太陽虫との近縁性が示唆されている (図 2 中①参照: Yabuki et al. 2012 *Protist* 163:356-388)。しかしこれまで決定された遺伝子配列に基づく系統解析では、*M. maris* の系統的位置は確定することができなかった。H26 年度までに Illumina Hi-seq2000 によるトランスクリプトームデータを取得し、これまで系統解析を行ってきた (独立行政法人海洋研究開発機構・矢吹彬憲博士との共同研究)。H29 年度に行った 157 遺伝子データに基づく系統解析では、*M. maris* は、テロネマ類 *Telonema subtilis*、ピコゾア類 *Picomonas* sp. と単系統と推測されたが、その系統関係はブートストラップ解析では支持されなかった (図 2 中①参照)。*Telonema* と *Picomonas* sp. のトランスクリプトームデータは遺伝子カバレッジが極めて低い。このため今回解析した 157 遺伝子データでもミッシングデータの割合が極めて高く、解析結果に信頼を置くことが難しい。今後 *M. maris* の系統的位置を再検証するには、再度 *T. subtilis* と *Picomonas* sp. から量的にも質的にも良質な配列データを取得し直すとともに、157 遺伝子データよりも大きなサイズのアライメントデータを作成し、系統解析を行う必要がある。

SRT605 株（図 2 中②参照）は、白鳥博士（筑波大学・現海洋研究開発機構）により単離された新奇真核微生物である。H28 年度には SRT605 株からトランスクリプトームデータを取得した。H29 年度学際共同研究プロジェクト REALPHYL として 93 遺伝子データに基づく系統解析を行ったが、残念ながら SRT605 株の系統的位は解明できなかった。H29 年度も引き続き解析を進め、157 遺伝子データを用いた系統解析を行った。この系統樹中ではアンキロモナス類 *Nutomonas longa* と姉妹群となったが、最尤法ブートストラップ法による支持は極めて低く、SRT605 株の系統的位は依然不明である（図 2 中②参照）。今後より大きな解析データを用意し SRT605 株の系統的位の確定を目指す。

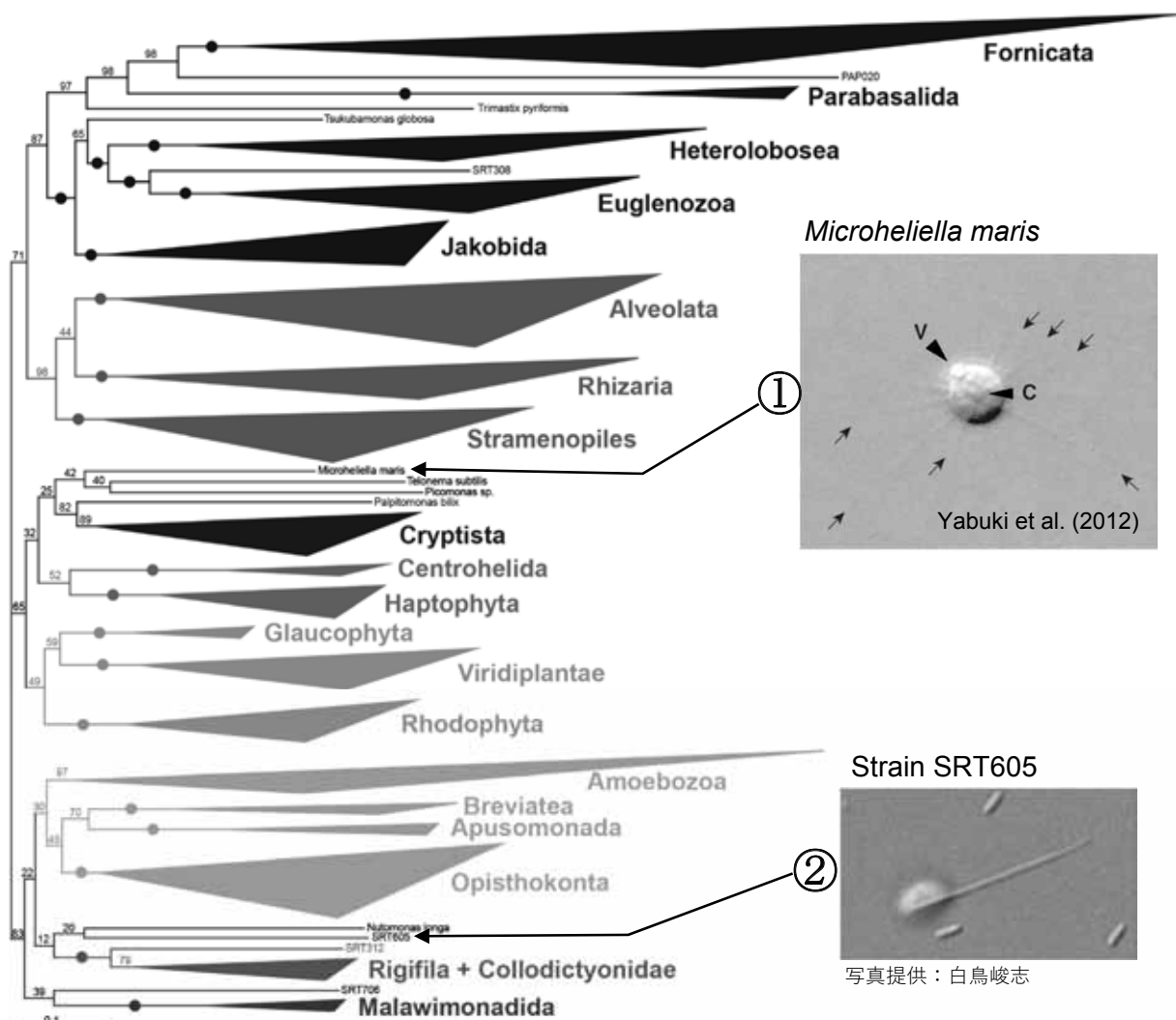


図 2. 157 遺伝子データに基づき推測された真核生物系統。系統樹の推測とブートストラップ解析は IQ-TREE を用いた。アミノ酸置換は LG + Γ + F + C60 モデルを使用した。*Microheliella maris* は *Telonema subtilis* とピコゾア類 *Picomonas* sp. と単系統群を形成した。また、SRT605 株はアンキロモナス類 *Nutomonas longa* と姉妹群となった（②参照）。しかし、どちらの系統関係も最尤法ブートストラップ解析の支持は低かった。●は最尤法ブートストラップ解析の支持が 100% を示す。

【2】 各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は渦鞭毛藻における葉緑体置換に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、渦鞭毛藻の色素体ゲノム解読を行っている。多くの渦鞭毛藻は紅藻の二次共生によって獲得された色素体（ペリディニン色素体）をもつが、これまでの研究により 3 種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻 2 種（MRD-151 株および TRD-132 株）では、祖先型のペリディニン色素体が、緑藻であるペディノ藻の三次共生に由来する緑藻型の色素体に置換されていることが判明している。上記 3 種は、互いに独立に細胞内共生させたペディノ藻を葉緑体化したと考えられる。従ってこれら 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディノ藻由来緑色葉緑体と自由生活性ペディノ藻葉緑体のゲノムを比較することで、渦鞭毛藻細胞内での共生とそれに引き続く葉緑体化過程における葉緑体ゲノム進化を検証することが可能である。

我々はこれまでに *L. chlorophorum* 色素体ゲノムを解読し論文として発表し（Kamikawa et al. 2015 *Genome Biol Evol* 7:1133-1140）、H27 年度年次報告書には MRD-151 株の色素体の全ゲノム配列を解読したことを報告した。H28 年度には TRD-132 株の色素体の全ゲノム配列を解読した（図 3）。これら 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディノ藻由来緑色葉緑体と自由生活性ペディノ藻葉緑体のゲノムを比較することで、渦鞭毛藻細胞内での共生とそれに引き続く葉緑体化過程における葉緑体ゲノム進化を検証することが可能である。

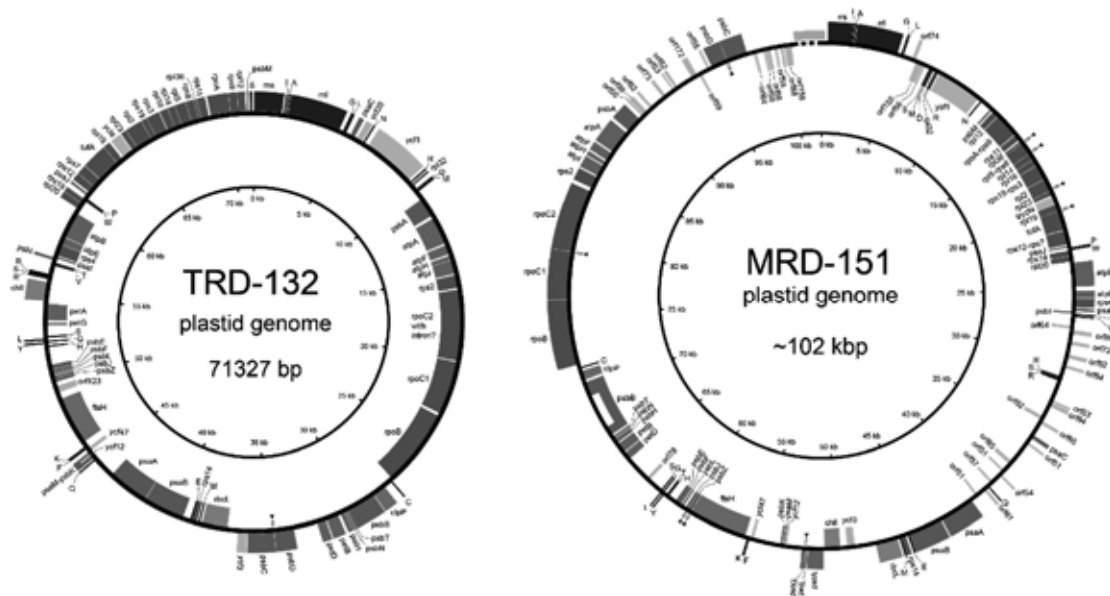


図 3. 未記載緑色渦鞭毛藻 MRD-151 株および TRD-132 株の色素体ゲノムマップ

H29 年度は 3 種の緑色渦鞭毛藻の色素体ゲノムとその起源となった自由生活性ペディノ藻 4 種の色素体ゲノムを比較した（表 1）。TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムは、自由生活性ペディノ藻色素体ゲノムに比べ、ゲノムサイズは明らかに縮小していることが判る。同様に機能が推測可能なタンパク質遺伝子数も、TRD-132 株/*L. chlorophorum* と自由生活性ペディノ藻の色素体ゲノム間で減少している。自由生活性ペディノ藻色素体ゲノムに比

べ TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムの縮小している原因は、タンパク質遺伝子数の減少に加え、逆位反復配列の消失、遺伝子と遺伝子の間の領域（非コード領域）の減少も貢献している。一方、MRD-151 株の色素体ゲノムは TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノム同様に、逆位反復配列の消失、機能が推測可能なタンパク質遺伝子数の減少が起こっているが、ゲノム全体のサイズは縮小していない。これは非コード領域の割合が多くなっていることが原因である。つまり、TRD-132 株と *L. chlorophorum* の色素体ゲノムに比べ、MRD-151 株の色素体ゲノムでは遺伝子が相対的に疎らに配置されているのである。緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムと自由生活性ペディノ藻色素体ゲノム間で最も特徴的な違いは、互いにオーバーラップした遺伝子ペアの数である。自由生活性ペディノ藻色素体ゲノムではオーバーラップした遺伝子ペアの数が 1~2 程度である一方、緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムでは 10 ペア以上がオーバーラップしている。オーバーラップ遺伝子ペア数がなぜ緑色渦鞭毛藻色素体ゲノムで多いのか、その進化的意義は今のところ不明である。今後、緑色渦鞭毛藻とは独立に細胞内共生緑藻を色素体化したユーグレナ藻とクロララクニオン藻の色素体ゲノムと、それぞれの色素体の起源となった緑藻色素体ゲノムを比較することにより、細胞内共生緑藻の色素体ゲノム進化の一般性と独自性について検討する必要がある。

表 1. 自由生活性ペディノ藻 4 種 (*Pedinomonas minor*, *P. tuberculate*, *Marsupiomonas* sp. NIES-1824 & *Pedinophyceae* sp. YPF701) と 3 種の緑色渦鞭毛藻間での色素体ゲノムの比較

	自由生活性ペディノ藻 (4 種)	TRD-132 株	MRD-151 株	<i>Lepidodinium chlorophorum</i>
ゲノムサイズ (Kbp)	92~127	71.3	~102	66.2
GC 含量 (%)	33.4~40.3	34.8	34.6	34.6
非コード領域 (%)	24.0~33.8	17.9	37.3	13.3
機能が推測可能なタンパク質遺伝子数	73~75	67	66	57
構造 RNA 遺伝子数	30~31	29	30	29
イントロン数	0~8	0	1	3
逆位反復配列	あり	なし	なし	なし
偽遺伝子数	0	0	1	1
融合した遺伝子数	0	4	5	2
オーバーラップした遺伝子ペア数	1~2	11	10	11

ミトコンドリアゲノム解析

我々は、これまで系統的に広範なミトコンドリア (Mt) ゲノムを解読し、真核生物進化における Mt ゲノムの構造、遺伝子組成、可動性イントロンの進化について研究を行ってきた (Masuda et al. 2011 *Harmful Algae*; Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol*; Nishimura et al. 2014

Mob Genet Elements; Takeuchi et al. 2015 *PLOS ONE*; Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol*)。今年度の報告書では、主に新奇真核微生物 SRT308 株の Mt ゲノムについて概要を報告する。

ユーグレノゾアは主にユーグレナ類、ディプロネマ類、キネトプラスト類から構成される。これら 3 系統毎に特徴的なミトコンドリア (Mt) ゲノム構造の進化が起こったと考えられるが、その過程は未解明であり、この生物群の Mt ゲノム構造多様化過程の解明にはその祖先的 Mt ゲノム構造の推測が重要である。新奇真核微生物 SRT308 株は、大規模系統解析によってユーグレノゾアクレード基部から分岐することが頑健に示された (H28 年度年次報告書参照)。我々は SRT308 株の Mt ゲノムがユーグレノゾア Mt ゲノムの祖先的特徴をもつ可能性があると考え、H29 年度に Mt ゲノムの解読を行った。その結果、SRT308 株 Mt ゲノムは約 61 キロ塩基長の環状分子であること、そこにコードされるタンパク質遺伝子組成は、ユーグレノゾア主要生物種の Mt ゲノムのタンパク質遺伝子組成の和集合に極めて近いことが判明した (図 4)。従って、SRT308 を含むユーグレノゾアの共通祖先は、少なくとも 19 個のタンパク質遺伝子を持つ環状 Mt ゲノムをもっていたと推測できる。一部のユーグレノゾア生物 Mt ゲノムからの転写物は、RNA 編集をうけゲノム DNA とは異なる塩基配列に変換される。そこで、今後、SRT308 株 Mt ゲノムからの転写物にも RNA 編集が起こるのかどうかを検討する必要がある。

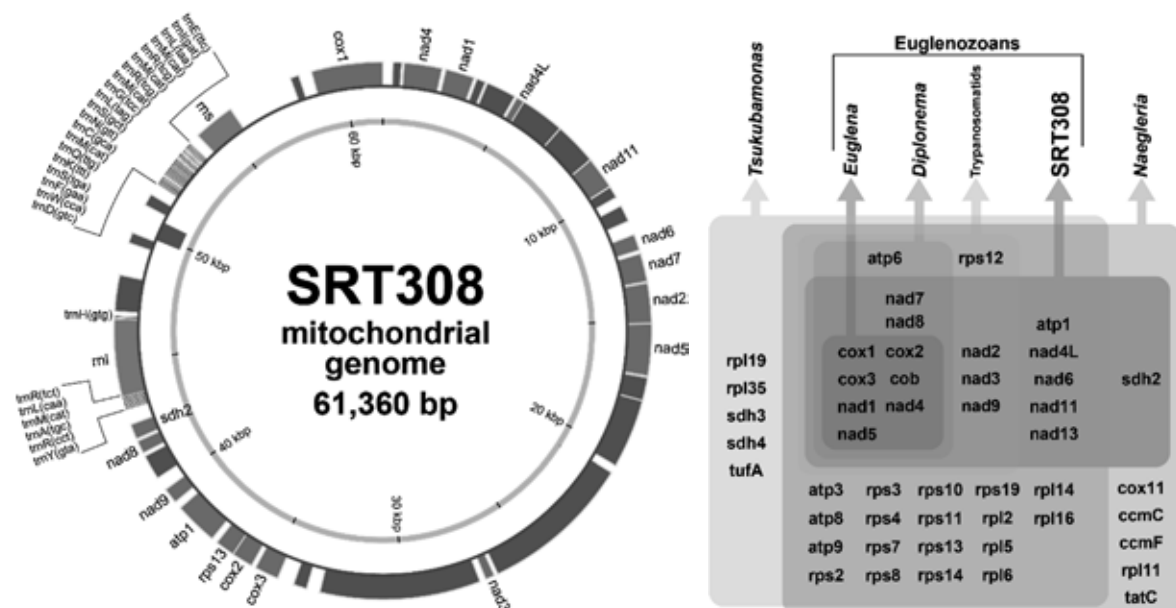


図 4. 新奇真核微生物 SRT308 株の Mt ゲノムマップ (左) とユーグレノゾア生物群及びその近縁種 (*Tsukubamonas* & *Naegleria*) における Mt ゲノムにコードされるタンパク質遺伝子のレパートリーを比較したベン図 (右)

SRT308 株の他、以下の真核微生物の Mt ゲノム解読を予定している：①クリプト藻に近縁な従属栄養性系統 *Hemiarma marina*、②新奇真核微生物 SRT605 株、③SRT312 株 (*Glissandra* sp.)、④SRT706 株、⑤有孔虫 *Ammonia berccari*、⑥放散虫 (*Didymocyrtis tetrathulumus* と *Acanthodesmia viniculata*)

オピストコンタ類におけるオートファジー機構の進化

オートファジーは細胞内の物質循環に重要な機構であり、一般にすべての真核生物がこれを持つと考えられている。しかし、オートファジーの研究が進んでいるのは酵母やヒトなどのモデル生物種に限られており、オートファジーの普遍性の検証には非モデル生物種をふくめ真核生物界全体からの知見が十分であるとはいえない。本研究は、真核生物全体においてオートファジー機構がどのように進化してきたかを解明することを目指し、その第一段階として最もオートファジー研究の進む酵母やヒトを含むオピストコンタとその早期分岐系統におけるオートファジーの進化の理解を目指した。オートファジーに重要とされるタンパク質である Atg8 及びその働きに重要とされる関連タンパク質群に注目し、それらをコードする配列を研究対象生物種のトランスクリプトームデータ中に探索し、その結果をもとに対象生物種におけるオートファジーの普遍性についての議論を目指している。

相同性検索によって抽出したオートファジー関連タンパク質の候補配列を精査した結果、Microsporidia を除いたすべてのオピストコンタの生物種で、Atg8 およびその関連タンパク質ホモログ配列が検出され、さらにオピストコンタ早期分岐系統である Ancyromonadida、Apusomonadida、Breviatea の生物種においてもオートファジー関連タンパク質が検出された。このことからオピストコンタの内部系統のみならず、その早期分岐系統においても、オートファジーの機構が保存されていることが示唆された。また、オートファジー関連タンパク質ホモログ配列が検出されなかった Microsporidia に近縁な系統である Rozellosporidia に属する *Rozella allomyces* で Atg8、Atg7、Atg3、Atg12 のホモログをコードする配列が検出されたことから、Microsporidia の生物種では、Rozellosporidia との分岐後、その共通祖先において、Atg8 およびその関連タンパク質が失われた可能性が高い。

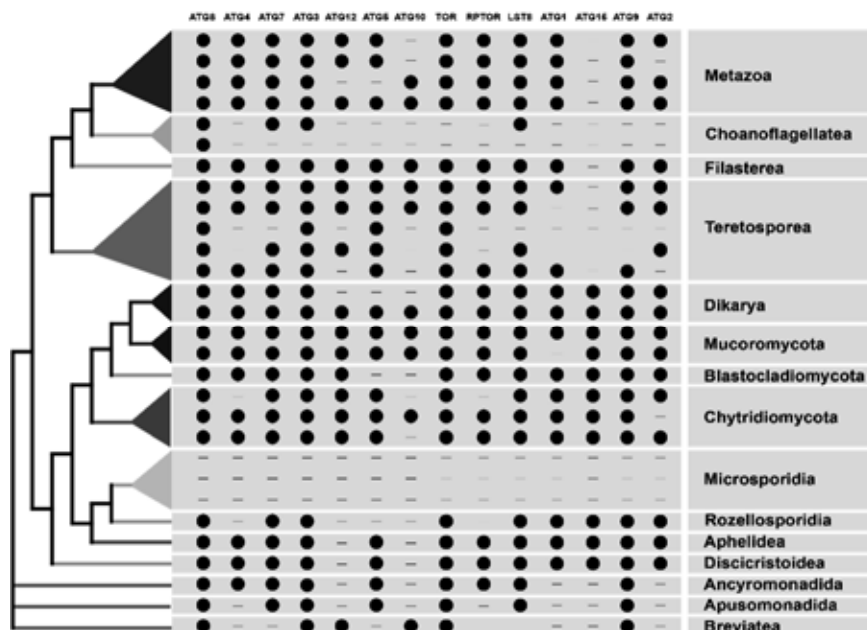


図 5. オピストコンタ類とその近縁系統におけるオートファジー関連タンパク質の保存性。●は該当する遺伝子（あるいは遺伝子転写物）が同定されたことを、ダッシュ（—）は同定されなかったことを示す。

【3】 分子系統解析の方法論研究

大規模遺伝子配列データに基づく分子系統解析の GPU 並列化

近年における大規模分子系統解析では数百以上の系統および遺伝子数からなる巨大アライメントが頻繁に用いられている。そのような解析では「系統間における遺伝子配列進化プロセスの不均一性」を考慮し、系統間で異なる進化プロセスをそれぞれ独立したパラメータとして推測する置換モデル（Non-Homogeneous モデル）の適用が推奨される。しかし、Non-Homogeneous モデルでは推測すべきパラメータ数が遺伝子配列データの配列数・座位数に応じて飛躍的に上昇し、実験室レベルの計算機では系統樹推測に数十日もの時間を要する問題が生じる。そのため、Non-Homogeneous モデルに基づく高速な分子系統解析を可能にするプログラムの開発は進化生物学における重要な計算科学的課題である。

H29 年度は、学際共同研究・学際開拓プロジェクトとして計算科学研究センター・高性能計算システム研究部門と連携し、Non-Homogeneous モデルを実装した系統解析プログラム NHML および BppML を GPU 並列化の対象とした。これらの分子系統解析プログラムでは最尤法に基づく系統樹の尤度計算アルゴリズムを実装しており、同アルゴリズムでは遺伝子配列データの各座位における系統樹の尤度計算をスレッド化することで GPU による並列計算が実現可能である。それとともに上記のプログラムへ、以下の 2 点の実装を目指した：①GPU メモリに転送し、これらの座位における尤度計算を行う間に次の部分的な座位データを GPU メモリに新たに転送する「計算とデータ転送のオーバーラップ化」、②異なる座位の尤度計算の複数 GPU での同時並列化。本研究ではコードの生産性と性能の両立を考慮し、GPU クラスタ用の並列プログラミング言語として XcalableACC を実装に用いた。

4. 教育

1) 修士論文

- ・ 宮田凌佑 「多足類消化管に寄生するグレガリナ様寄生虫の系統学的位置と非光合成性色素体の探索」（生命環境科学研究科生物科学専攻）

2) 卒業論文

- ・ 岩本亮介 「見せてもらおうか、縮退進化したミトコンドリアの性能とやらを」（生命環境学群生物学類）
- ・ 上原忠晃 「オピストコンタ早期分岐系統におけるオートファジー関連遺伝子の網羅的探索」（生命環境学群生物学類）

3) 集中講義

橋本哲男：「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」

計算科学リテラシー（日・英）2018 年 2 月

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

- 1) 松尾恵梨子（博士後期課程 3 年） ICOP2017 Holz-Conner Travel Award
- 2) 宮田凌佑（博士前期課程 2 年）筑波大学大学院生命環境科学研究科 専攻長表彰

外部資金

- 1) 科学研究費補助金基盤研究（B），橋本哲男（代表）／稲垣祐司（分担），2015-2017 年度，交付額：直接経費 3,700 千円，間接経費 1,110 千円，「新型分割イントロンのスプライシング機構と進化多様性の解明（課題番号 15H04406）」
- 2) 科学研究費補助金基盤研究（B）海外学術，橋本哲男（代表）／稲垣祐司（分担），2015-2017 年度，交付額：直接経費 2,500 千円，間接経費 750 千円，「嫌気環境に生育する真核微生物の多様性の解明（課題番号 15H05231）」
- 3) 科学研究費補助金基盤研究（B），稲垣祐司（代表），2016-2018 年度，交付額：直接経費 4,500 千円，間接経費 1,350 千円，「渦鞭毛藻細胞内に発見された新たな共生体痕跡核ゲノムの解析（課題番号 16H04826）」
- 4) 科学研究費補助金基盤研究（B），稲垣祐司（分担）（代表・濱健夫），2016-2018 年度，交付額：直接経費 3,300 千円，間接経費 990 千円，「海洋バクテリアの長期炭素隔離機能に対する海洋酸性化の影響評価（課題番号 16H02967）」
- 5) 科学研究費補助金基盤研究（B），稲垣祐司（分担）（代表・谷藤吾朗），2017-2020 年度，交付額：直接経費 5,200 千円，間接経費 1,560 千円，「非光合成生物の光適応進化の全容解明（17H03723）」
- 6) 科学研究費補助金基盤研究（C），石谷佳之（代表），2018-2020 年度，交付額：直接経費 2,000 千円，間接経費 600 千円，「大規模分岐年代推定－真核生物の誕生と進化を解き明かす！－（課題番号 18K03820）」
- 7) 科学研究費補助金基盤研究（B），石谷佳之（分担）（代表・氏家由利香），2017-2019 年度，交付額：直接経費 7,100 千円，間接経費 2,130 千円，「有孔虫における殻形成機構の解明－石灰化のブラックボックスを開く－（17H02978）」
- 8) 科学研究費補助金基盤研究（C），石谷佳之（分担）（代表：藤木 徹一），2016-2018 年度，交付額：直接経費 1,500 千円，間接経費 450 千円，「原核藻類と原生動物の光共生に関する研究（課題番号 16K00532）」
- 9) 科学研究費補助金若手研究（B），湯山育子（代表），2015-2017 年度，交付額：直接経費 1,100 千円，間接経費 330 千円，「造礁性サンゴにおける遺伝子ノックダウン技術の確立と応用（課題番号 15K18744）」

知的財産権

なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Kamikawa R, Yazaki E, Tahara M, Sakura T, Matsuo E, Nagamune K, Hashimoto T, Inagaki Y. Fates of evolutionarily distinct, plastid-type glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase genes in karenian dinoflagellates. 2018 *Journal of Eukaryotic Microbiology* in press.
2. Tanifuji G, Takabayashi S, Kume K, Takagi M, Nakayama T, Kamikawa R, Inagaki Y, Hashimoto T. The draft genome of *Kipferlia bialata* reveals reductive genome evolution in fornicate parasites. 2018 *PLOS One* 13(3): e0194487.
3. Záhonová K, Petrželková R, Valach M, Yazaki E, Tikhonenkov DV, Butenko A, Janoušková J, Hrdá Š, Klimeš V, Burger G, Inagaki Y, Keeling PJ, Hampl V, Flegontov P, Yurchenko V, Eliáš M. Extensive molecular tinkering in the evolution of the membrane attachment mechanisms of the Rheb GTPase. 2018 *Scientific Reports* 8:5239.
4. Brown MB, Heiss A, Kamikawa R, Inagaki Y, Yabuki A, Tice AK, Shiratori T, Ishida K, Hashimoto T, Simpson AGB, Roger AJ. Phylogenomics places orphan protistan lineages in a novel candidate super-group. 2018 *Genome Biology and Evolution* 10(2):427-433.
5. Nakayama T, Inagaki Y. Genomic divergence within non-photosynthetic cyanobacterial endosymbionts in rhopalodiacean diatoms. 2017 *Scientific Reports* 7:13075.
6. Tanifuji G, Curtis BA, Cenci U, David V, Dean S, Fiala I, Flegontov P, Johnson-MacKinnon J, Kelly S, McPhee M, Moog D, Nakayama T, Tanifuji-Onodera N, Sibbald S, Inagaki Y, Hashimoto T, Gull K, Lukeš J, Archibald JM. Genome sequencing reveals metabolic and cellular interdependence in an amoeba-kinetoplastid symbiosis. 2017 *Scientific Reports* 7:111688.
7. Higuchi T, Shirai K, Mezaki T, Yuyama I. Temperature dependence of aragonite and calcite skeleton formation by a scleractinian coral in low mMg/Ca seawater. *Geology* 45:1087-1090.
8. Kamikawa R, Moog D, Zauner S, Tanifuji G, Ishida K, Miyashita H, Mayama S, Hashimoto T, Maier UG, Archibald JA, Inagaki Y. A non-photosynthetic diatom reveals early steps of reductive evolution in plastids. 2017 *Molecular Biology and Evolution* 34(9):2355-2366.
9. Leger MM, Kolisko M, Kamikawa R, Stairs CW, Kume K, Čepička I, Silberman JD, Andersson JO, Xu F, Yabuki A, Takishita K, Inagaki Y, Simpson AGB, Hashimoto T, Roger

AJ. Organelles that illuminate the origins of *Trichomonas* hydrogenosomes and *Giardia* mitosomes. 2017 *Nature Ecology & Evolution* 1(4):0092.

B) 査読無し論文

1. **Matsuo E, Inagaki Y.** Trends in reconstruction of three nucleus-encoded, plastid-localized pathways for the heme, chlorophyll *a* and isopentenyl diphosphate biosyntheses in two separate dinoflagellate lineages bearing non-canonical plastids. *PeerJ Preprints* 5:e3488v1.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

1. **Ishitani Y***. Molecular marker to identify radiolarian species –toward establishment of paleo-environmental proxy– 2017 年 12 月 11 日 –15 日 AGU Fall Meeting. New Orleans, USA.
2. **Ishitani Y***, Ujiie Y, **Inagaki Y**, Takishita K. Sepciation and dispersal pattern of marine protists in the vertical dimension. 2017 年 10 月 22 日 –27 日 InterRad XV in Niigata 2017. Niigata University, Niigata, Japan.
3. **Yuyama I**, Identification of genes related to aragonite/calcite crystal growth in corals. 2017 年 10 月 9 –13 日. 14th International Symposium on Biomineralization. Tsukuba, Japan.
4. **Yazaki E***, Shiratori T, **Kume K**, **Hashimoto T**, Ishida K, **Inagaki Y**. Mitochondrial genome of a protist branched at the base of Euglenozoa. 2017 年 9 月 8 日 –10 日 An SMBE Satellite Meeting, Mitochondrial Genomics and Evolution. Ein Gedi Kibbutz Hotel, En Gedi, Israel.
5. **Matsuo E***, Takahashi K, Sarai C, Iwataki M, **Inagaki Y**. Contribution of chlorarachniophytes to the chlorophyll *a* synthesis in green-colored dinoflagellates. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15th International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
6. **Matsuo E**, Morita K, Tanifuji G, Nakayama T, Takahashi K, Sarai C, Iwataki M, **Inagaki Y***. Parallel genome reduction in pedinophyte-derived plastids in green-colored dinoflagellates. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15th International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
7. Záhonová K*, Petrželková R, **Yazaki E**, Nishimura Y, Valach M, Hrdá Š, Klimeš V, **Inagaki Y**, Burger G, Hampl V, Yurchenko V, Eliáš M. Molecular tinkering in the evolution of the membrane attachment mechanisms of the Rheb GTPase. 2017 年 7 月 31 日 –8 月 4 日 15th International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.

8. Yazaki E*, Shiratori T, Kume K, Hashimoto T, Ishida K, Inagaki Y. A heterolobosean strain SRT213 and its mitochondrion-related organelle. 2017 年 7 月 31 日－8 月 4 日 15th International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.
9. Shiratori T*, Yazaki E, Inagaki Y, Ishida K. Morphology, ultrastructure and phylogeny of a new species of *Glissandra* (Protista incertae sedis). 2017 年 7 月 31 日－8 月 4 日 15th International Congress of Protistology. Hotel Pyramida, Prague Czech Republic.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 稲垣祐司*. 真核生物系統をより広く、より深く. 2018 年 3 月 23 日 第 1 回原生生物進化生態研究会. 東北大学青葉山新キャンパス, 仙台市, 宮城県.
2. 松尾恵梨子*, 稲垣祐司. 葉緑体を置換した渦鞭毛藻におけるゲノム進化. 2018 年 2 月 20 日 東京大学本郷キャンパス, 文京区, 東京都.
3. 石谷佳之. “いがい”と流されない海の原生生物. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.

B) その他の発表

1. 中山卓郎*, 高野義人, 野村真未, 柴小菊, 稲葉一男, 稲垣祐司. 外洋性渦鞭毛藻 *Ornithocercus magnificus* に見られる共生シアノバクテリアのゲノム解析. 3 月 24 日－25 日 日本藻類学会第 42 回大会. 東北大学青葉山新キャンパス, 仙台市, 宮城県.
2. 西村祐貴*, 白鳥峻志, 石田健一郎, 橋本哲男, 稲垣祐司, 大熊盛也. 有中心粒太陽虫類におけるミトコンドリアゲノムの解読. 2018 年 3 月 5 日－7 日 第 12 回ゲノム微生物学会. 京都大学桂キャンパス船井哲良記念講堂, 京都市, 京都府.
3. 湯山育子. 造礁性サンゴ褐虫藻の細胞内共生に関する研究. 2017 年 11 月 23－26 日 第 20 回日本サンゴ礁学会. 東京工業大学大岡山キャンパス, 目黒区, 東京都
4. 矢崎裕規*, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. ユーグレノゾア基部から分岐する新奇原生生物のミトコンドリアゲノム. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.
5. 宮田凌佑*, 松尾恵梨子, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 千頭康彦, 八畑謙介, 稲垣祐司. 陸生節足動物消化管から単離されたグレガリナ様寄生虫の系統学的位置と非光合成性色素体の探索. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.

6. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生関係の破綻にはサンゴ免疫系の暴走が関係する. 2017 年 11 月 17 日－19 日 第 50 回日本原生生物学会・第 1 回日本共生生物学会合同大会 筑波大学, つくば, 茨城.
7. 松尾充啓*, 潟端篤, 立川誠, 水口洋平, 野口英樹, 豊田敦, 藤山秋佐夫, 鈴木穰, 中山卓郎, 神川龍馬, 野村真未, 稲垣祐司, 石田健一郎, 小保方 潤一. 有殻アメーバのゲノム解読による一次細胞内共生進化の初期プロセスの解析. 2017 年 9 月 8 日－10 日 日本植物学会第 81 回大会. 東京理科大学野田キャンパス, 野田市, 千葉県.
8. 矢崎裕規*, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. 新奇ヘテロロボサ生物 SRT213 における縮退的ミトコンドリア機能の推測. 2017 年 8 月 24－26 日 日本進化学会第 19 回大会. 京都大学吉田キャンパス, 京都市, 京都府.
9. 宮田凌佑*, 松尾恵梨子, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 千頭康彦, 八畑謙介, 稲垣祐司. セスジアカムカデ消化管内寄生虫の網羅的 mRNA データに基づくアピコンプレクサの初期進化に関する一考察. 2017 年 8 月 24－26 日 日本進化学会第 19 回大会. 京都大学吉田キャンパス, 京都市, 京都府.
10. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生関係成立・崩壊に関わる遺伝子の解析. 2017 年 6 月 19 日第 47 回つくば藻類プロティストフォーラム. 筑波大学, つくば市, 茨城県.
11. 湯山育子. サンゴ褐虫藻の細胞内共生成立時に見られるダイナミックな遺伝子発現変動. 2017 年 6 月 3－4 日 第 19 回マリンバイオテクノロジー学会大会. 東北大学青葉台キャンパス, 仙台市, 宮城県.
12. 杉崎真*, 神川龍馬, 稲垣祐司, 橋本哲男, 谷藤吾朗. ランブル鞭毛虫近縁種における分割イントロン (splintron) の探索: splintron の普遍性と成立機構の解明に向けて. 2017 年 5 月 28 日－29 日 第 86 回日本寄生虫学会大会. 北海道大学学術交流会館, 札幌市, 北海道.
13. 井上貴史, 谷藤吾朗, 神川龍馬, 久米慶太郎, 稲垣祐司, 橋本哲男*. *Giardia* に近縁な自由生活性鞭毛虫 *Dysnectes brevis* の MRO 機能の推測. 2017 年 5 月 28 日－29 日 第 86 回日本寄生虫学会大会. 北海道大学学術交流会館, 札幌市, 北海道.

(4) 著書、解説記事等

なし

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 1) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ) および A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 大・カナダ) との共同研究：メタモナス生物群の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の解析
- 2) E. Kim 博士 (American Museum of Natural History・アメリカ合衆国) との共同研究：カタブレファリス類のミトコンドリアゲノム解析
- 3) M. Eliáš 博士 (Ostrava 大学・チェコ共和国) 等との共同研究：ヘテロロボサ類の系統関係と嫌気性ミトコンドリア機能の進化

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 1) 第 1 回原生生物進化生態研究会．開催場所：東北大学理学部，仙台，宮城県．日時：2018 年 3 月 21 日．オーガナイザー：稲垣祐司

9. 管理・運営

稲垣祐司：生命環境科学研究科教務委員、生物科学専攻カリキュラム委員、計算科学研究センター運営委員、計算科学研究センター共同研究委員

10. 社会貢献・国際貢献

- 1) 稲垣祐司：International Society for Evolutionary Protistology 会長 (2017-2018)
- 2) 稲垣祐司：さくらサイエンスプラン実習（対象：マレーシア工科大学学生および大学院生）2018 年 3 月 6－8 日

11. その他

- 1) パラオ共和国における生物採集調査（山形大学グループと共同），期間：2017 年 11 月 2－9 日，参加者：石谷、稲垣、矢崎
- 2) マレーシアにおける生物採集調査（マレーシア工科大学と共同），期間：2018 年 2 月 11－18 日，参加者：石谷、稲垣、矢崎