

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（数理物質科学研究科）
教授	庄司 光男（数理物質科学研究科）
教授	谷 一寿（生命環境科学研究科）
准教授	原田 隆平（生命環境科学研究科）
助教	Kowit Hengphasatporn（生命環境科学研究科）
助教	段 錬（生命環境科学研究科）
研究員	宮川 晃一
研究員	山守 優（2026.1 RIST へ異動）
研究員	齋藤 一弥
学生	大学院生 10 名、学類生 6 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生体分子に注目し、その機能を分子構造、構造動態、電子状態レベルからより詳細に解明することを目的としている。令和7年度は大きく研究進展があった下記の4つのトピックスとして、【1】「酸素非発生源型光合成機構の解明」、【2】「生体分子内環境を模倣する環境モデルの開発」、【3】「計算化学と分光実験の連携による DNA(6-4)光回復酵素の反応中間体の同定」、【4】メイラード反応における反応素過程の理論解明を取り上げ、これらのトピックスについて研究概略を記載する。これらの研究は、計算科学研究センターのスパコン（Cygnus, Pegasus）、および国内のスパコンを利用して遂行した。また、筑波大学内外の研究グループとも共同研究し、新しい研究に積極的に取り組んだ。

3. 研究成果

[1] 酸素存在下でも生育する光合成細菌の高効率エネルギー変換機構を解明

酸素存在下でも生育可能な海洋性光合成細菌 *Rhodovulum sulfidophilum* が持つ、高効率なエネルギー変換機構を解明した。一般的な光合成細菌は酸素に弱い、本細菌は近赤外光を活用しつつ酸素下でも活動できる高い環境耐性を持つものであり、特に、本種のような光合成装置である LH1-RC 複合体が、少ないヘム数でいかに効率的なエネルギー変換を実現しているのかは重要な課題であった。クライオ電子顕微鏡による高分解能解析の結果、新規膜タンパク質「protein-3h」の存在が特定された。このタンパク質の関与により、リング状の構造に「開口部」が形成され、電子伝達を担うキノン分子の出入り口として機能することが判明した。さらに、不足するヘムを補うように特定の部位でアミノ酸の置換が起きているほか、近傍の「非ヘム鉄」が電子の中継点となる独自の「電子リレー機構」を備えている可能性も示された。こうした構造的特徴により、本細菌は環境に応じて伝達経路を柔軟に使い分け、過酷な条件下でも高い効率を維持している。本成果は、光合成の分子機構への理解を深めるとともに、バイオテクノロジーや環境インフラ分野への応用を大きく前進させるものである。

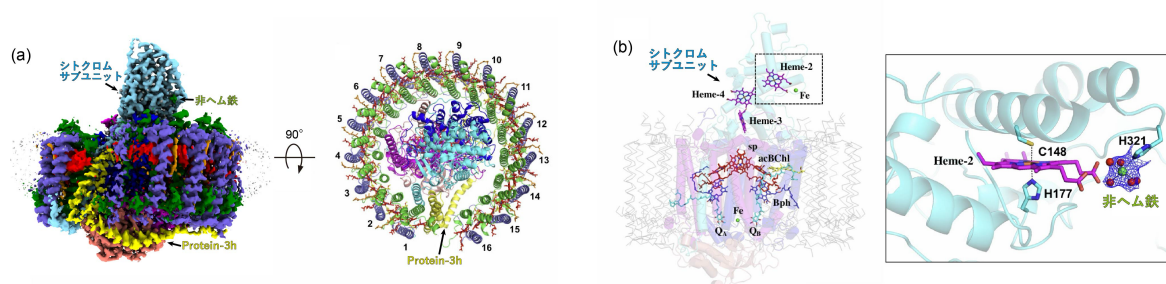


図 1. (a) 海洋性紅色非硫黄細菌の LH1-RC 複合体の構造。新たに発見された膜タンパク質 protein-3h(黄色)と (b) 特徴的な 3 ヘム型 LH1-RC 複合体構造。

[2] 生体分子内環境を模倣する環境モデルの開発

分子動力学計算 (MD 計算) によりリボソームやシャペロンなどの分子内でとりうるタンパク質の立体構造を調べる場合、カーボンナノチューブやフラーレンが用いられてきた。

しかし、これらの単純

なモデルは均一かつ疎水的であり、多様な化学的組成を示す生体内環境と比較して乖離が大きい。そこで本研究では、任意の化学特性を示す球形および円筒形モデルを生成するツールとして BEMM-GEN (Biomolecular Environment-Mimicking Model Generator, 図 2) [T. Yasuda et al, *J. Chem. Inf. Model.*, **64**, 7184-7188 (2024)] を開発し、細胞内環境でとりえる立体構造を調べた。BEMM-GEN は、細胞内環境を模倣した MD 計算を実行する際の初期構造を生成するオープンソースプログラムである。このツールを用いることで、ユーザが指定した化学的組成とタンパク質を入力し、環境モデルとタンパク質の複合体を構造情報として出力できるため、ユーザはこれらのファイルを用いて MD 計算を実行できる。また、BEMM-GEN ではデフォルトで異なる化学的性質を有する 16 種類の残基を用意しているが、ユーザーが SMILES 形式で指定した残基を量子化学計算に基づき追加する機能も備えている。

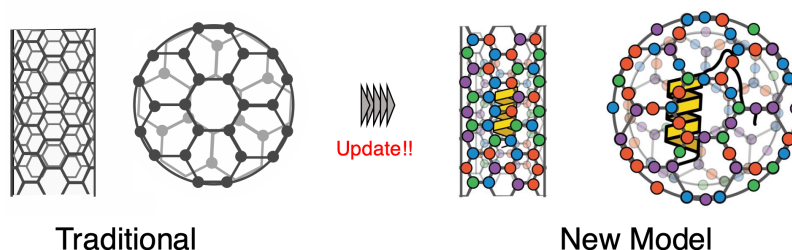


図 2. 細胞内環境モデリングツール (BEMM-GEN)

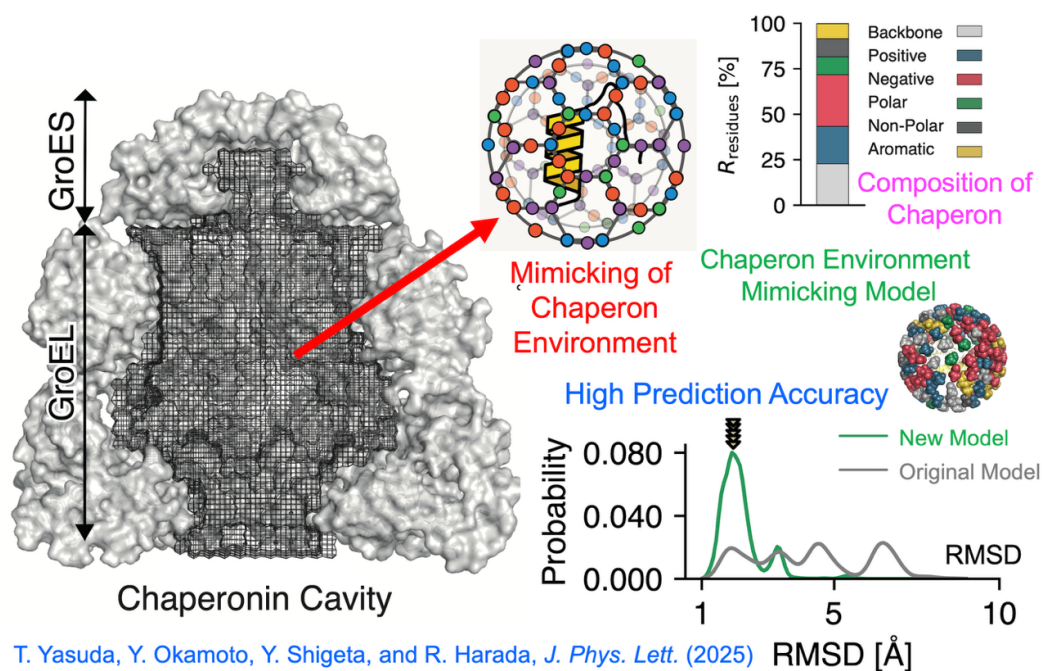


図 3. シャペロン内環境模倣モデル (CHEMM)

なお、インストールについては、Github (<https://github.com/y4suda/BEMM-GEN>) から実行できる。適用研究として、BEMM-GEN を用いてシャペロントンネル内環境を模倣した CEMM (Chaperon Environment Mimicking Model) [T. Yasuda et al, *J. Phys. Lett.*, 64, 6610-6622 (2025)] を作成し、トンネル内における 2 次構造形成を明らかにした。具体的には、分子シャペロン内を球状と近似した疎水球モデル（フラーレン型）を拡張した模倣モデルとして、GroEL/ES の実験構造をもとに試作した模倣モデルと疎水球モデルの内部にモデルタンパク質（BBA）の変性構造を配置して MD により安定性を調べたところ、疎水球モデルよりも模倣モデルが天然構造を高確率で安定化できることが分かり、修正機能の高さが示唆された（図 3）。今後は、CEMM を様々なタンパク質に適用し、特殊環境におけるフォールディングメカニズムを解明していく予定である。

[3] 計算化学と分光実験の連携による DNA (6-4) 光回復酵素の反応中間体の同定

紫外線によって DNA に形成される (6-4) 光産物 ((6-4) PP) は皮膚がんなどを引き起こす深刻な損傷であり、多くの生物は (6-4) 光回復酵素によって修復する。しかしその反応機構には長年の論争があり、特に「2 光子メカニズム」における未知の中間体 X の構造は不明であった。本研究では、時間分解分光法と計算化学を組み合わせ、中間体 X がオキセタン環を持つ構造であることを分子レベルで決定した。計算化学の解析では、密度汎関数法 (DFT) を用いてチミンダイマー (TT)、(6-4) PP、オキセタン構造の水溶媒効果や分散力補正を考慮した最適化を行った。さらに時間依存 DFT (TD-DFT) による UV 吸収差スペクトルのシミュレーションを実施し、実験で観測された 250 nm のピークを再現した。さらに、オキセタン環特有の低波数振動モードに着目し、 ^{18}O 同位体標識を考慮した振動解析計算を行ったところ、C5-O4' -C4' 角の曲げ・伸縮振動におけるピークシフトを正確に予測し、実験データと誤差 30 cm^{-1} 以内で一致した。これにより、中間体 X がオキセタン構造であることが確定された。

(図 4)。本研究は、(6-4)光回復酵素の反応過程におけるオキセタン中間体の存在を実験と理論の両面から証明し、2光子修復メカニズムを実証した初めての試みである。計算化学は、分光データを分子構造へと結びつける橋渡しとして機能し、特に同位体シフトの再現によって中間体の正体を決定づけた。今後は、酵素がこの不安定な中間体をどのように安定化させているかの詳細な解析へと展開することが期待される。なお、この成果については、プレスリリースを行った。

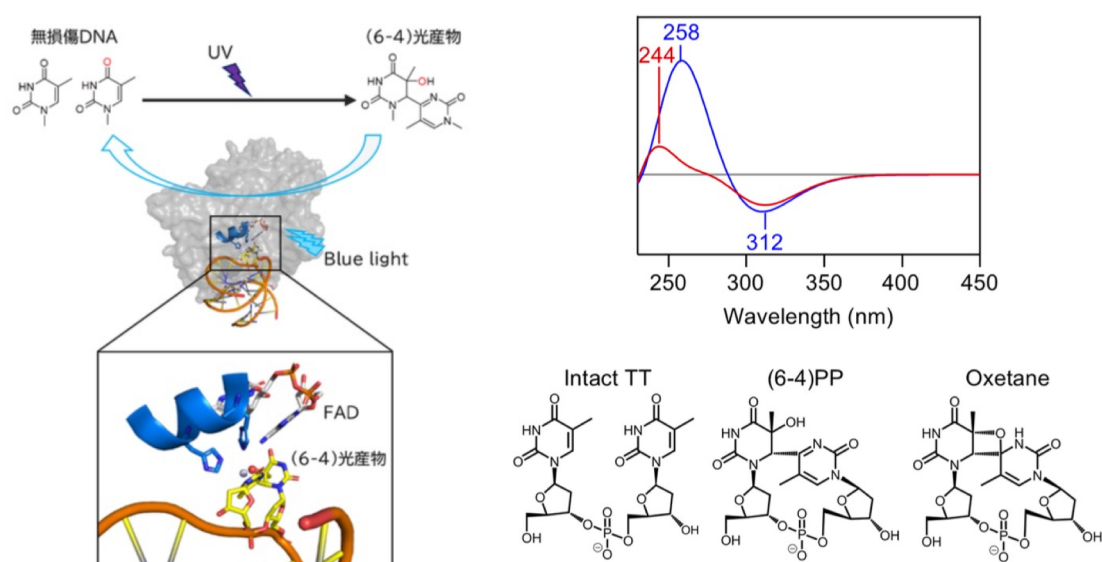


図 4. 光回復酵素による光損傷回復メカニズムと、理論計算による中間体の同定

[4] メイラード反応における反応素過程の理論解明

メイラード反応はアミノ化合物（アミノ酸など）とカルボニル化合物（還元糖など）が非酵素的に反応する褐変反応であり、食品加工や貯蔵時に普遍的に起こる。トーストの焼き色や香り、ビールの琥珀色、醤油やコーヒーの褐色色素はメイラード反応によってもたらされる。メイラード反応は初期、中期、後期段階に分けられ、初期段階では、還元糖のカルボニル基とアミノ化合物のアミノ基間の脱水縮合と化学的転移により、アマドリ化合物が生成される。中期段階ではアマドリ化合物の分解により、反応性の高い種々のカルボニル化合物が形成される。後期段階ではカルボニル化合物とアミノ化合物がさらに反応し、脱水、縮合、酸化など複雑な過程を経て、メラノイジンのような高分子褐色色素や香気成分、味修飾物質など、多種多様な化合物が形成される。中期過程では反応中間体からストレッカー分解に向かう経路も存在する。ストレッカー反応も香気に大きく関与している。ストレッカー反応の中でもグリシンとメチルグリオキサルからアミノアセトンが生成する反応は、最も基本的な反応であるが、これまでの量子化学反応解析では、反応障壁が 70 kcal mol^{-1} と非常に高かった。この結果は、 $100\text{-}140$ 度で進行する実験結果とは整合しない。そのため、宇宙生命分野で開発してきたランダムサンプリング(RS)法を用いて、最安定コンフォメーションを探索しつつ、エネルギーが低い遷移状態を探索した。その結果、新たな 5 員環を形成する反応

経路を見出し、遷移状態エネルギーは 25 kcal mol^{-1} 以下となった(図 5)。水溶媒中でのエネルギープロファイルは気相中と異なる反応速度となることがわかった。本結果は、溶媒和で反応速度が大きく変化する実験結果と良く対応することがわかった。

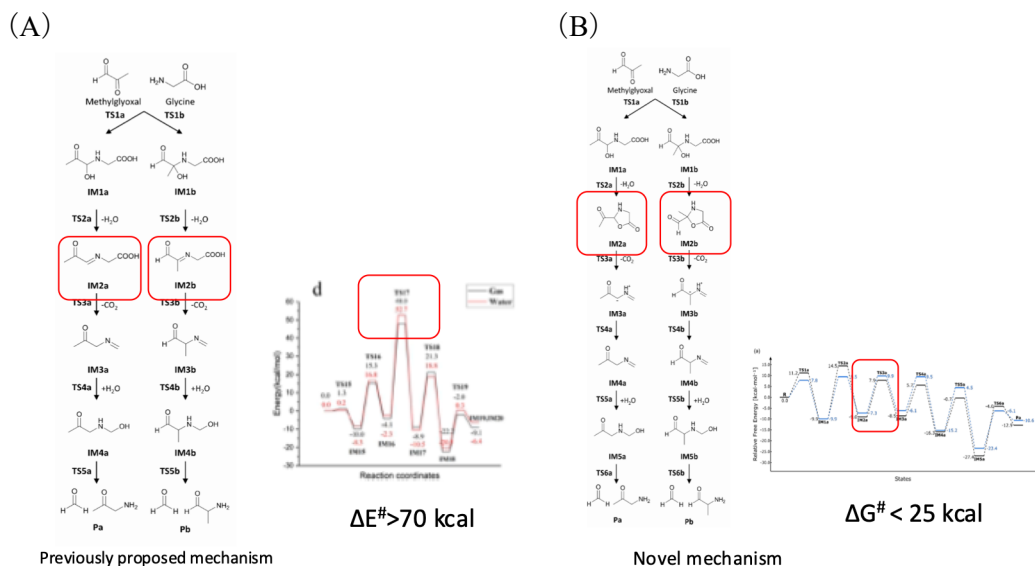


図 5. メイラード反応ストレッカー分解における(A)以前の反応経路と反応プロファイルと(B)本研究で得られた新しい反応経路と反応プロファイルの比較

4. 教育

(物理学類) <学士卒業研究発表>

有働 大朔 「 β -cyclodextrin の host-guest 包摂に関する理論研究」

徐 銘駿 「QM/MM 法に基づく効率的自由エネルギー計算手法の検討」

渡邊 浩平 「核酸塩基に対する最安定エネルギー原理の検証」

蔣 弼琦 「銅含有アミン酸化酵素の構造変化に対する自由エネルギー解析」

(生物類) <学士卒業研究発表>

藤井 貴裕 「タンパク質分散系において遊離アミノ酸が引き起こす安定化効果」

粕渕 友理 「分子シミュレーションで紐解くヒトパーフォリンの膜上拡散に対する膜組成の影響」

(物理学学位プログラム博士前期課程) <修士修了研究発表>

謝 恩来 「蛋白質二次構造における量子化学計算手法の精度と計算時間についての理論的研究」

(生物学学位プログラム博士前期課程)

小幡 昂諒 「亜鉛輸送体タンパク質が駆動する亜鉛輸送メカニズムの解明」

(物理学学位プログラム博士後期課程) <博士修了研究発表>

工藤 玄己 「Computational Approaches Toward the Rational Design of Diverse Drug Modalities」

渡辺 七都稀 「Development of Machine Learning-Based Molecular Simulation Frameworks and Theoretical Application to Interstellar Chemistry」

石田 翔太 「Theoretical studies on the reaction mechanism of the Maillard reaction」

集中講義など

1. 重田 育照、「Quantum Chemistry」（英語による講義）、早稲田大学理工学術院、2025年10月8日-2026年1月21日
2. 重田 育照、「計算化学」、早稲田大学理工学術院、2025年10月8日-2026年1月21日

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

1. 2025年度 筑波大学 Best Faculty Member 賞、谷 一寿、「クライオ電子顕微鏡を用いた膜タンパク質複合体の構造機能研究」、2026年2月20日
2. 2025年度 筑波大学 数理物質科学研究群 物理学学位プログラム 研究学群長賞、工藤玄己、2026年3月
3. 2025年度 筑波大学 学長賞表彰、工藤 玄己、2026年3月
4. 2025年度 筑波大学 茗溪会賞、工藤 玄己、2026年3月
5. 2025年度 筑波大学 校友会江崎賞 渡辺 七都稀、2026年3月
6. 2025年度 筑波大学大学院 理工情報生命学術院 生物学位プログラムリーダー表彰 小幡 昂諒、2026年3月
7. 2025年度 筑波大学大学院 理工情報生命学術院 生命地球科学研究群長表彰、小幡 昂諒、2026年3月
8. 第65回 生物物理若手の会夏の学校 優秀ポスター発表賞、青木 斗真、2025年3月
9. Best Poster at the 5th International Symposium on Frontiers in Molecular Science (ISFMS), Wanda Destiarani, 2025年8月

外部資金

(研究代表)

1. 文部科学省 科学研究費 学術変革領域研究 A「メゾヒエラルキーの物質科学」、重田 育照（代表）、2023-2027年度、7,800千円「メゾヒエラルキー理論」計画研究
2. 文部科学省 科学研究費 若手研究 K. Hengphasatporn、(代表) 2024-2026年度、1,700千円「FMO/ML-Guided Drug Design: Accelerating Novel Inhibitor Development and Drug Discovery」
3. 文部科学省 科学研究費 学術変革領域研究 A、庄司 光男（代表）、2025-2026年度、2,800千円「光化学系II酸素発生中心を創る」
4. 日本学術振興会 科学研究費 基盤研究 (B)、原田 隆平、(代表)、2025-2029年度、14,400千円「薬効発揮に重要な長時間ダイナミクスを抽出・解析する分子シミュレーション手法の開発」

5. 公益財団法人 豊田理化学研究所 豊田理研スカラー (Phase1)、原田 隆平 (代表)、
「植物ペプチドホルモンの進化多様性を解明するドライとウェットの真の融合研究」
2025 年度、800 千円、「植物ペプチドホルモンの進化多様性を解明するドライとウェットの真の融合研究」
6. 住友電工グループ 社会貢献基金、原田 隆平 (代表)、2025-2026 年度、1,290 千円
「生体内環境におけるタンパク質の構造形成・修復メカニズムを解明する計算モデルの開発」
7. 第 3 回 MOLSIS-CCG GRANT、原田 隆平 (代表)、2024-2026 年度、500 千円「分子間相互作用から疾患原因を推定する異常検知システムの構築」
8. 公益財団法人 島津科学技術振興財団 研究開発助成、原田 隆平 (代表)、2023-2025 年度、1,000 千円「タンパク質の複合体と相互作用を高精度に計測する計算技術の開発」
9. 公益財団法人 カシオ科学振興財団 研究助成金、原田 隆平 (代表)、2024-2025 年度、1,000 千円「タンパク質と核酸の「揺らぎ」を考慮したフレキシブルドッキングに基づく複合体モデリング技術の開発」
10. 公益財団法人 UBE 学術振興財団 学術奨励賞 援助金、原田 隆平 (代表)、2024-2025 年度、1,000 千円「疾患原因につながる相互作用を特定する異常検知システムの開発」

(分担研究)

1. JST-CREST、重田育照 (分担)、廣田俊 (代表)、2021-2026 年度、8,400 千円「3D ドメインスワッピングを利用したタンパク質の自在制御と機能化」
2. Q Leap、重田育照 (分担)、馬場嘉信 (代表)、2022-2025 年度、3,000 千円「量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」
3. 文部科学省 科学研究費 基盤研究(B)、重田育照 (分担)、守屋俊夫 (代表)、2023-2025 年度、500 千円「クライオ電顕による 1 分子構造解析に基づいた蛋白質構造の連続的なダイナミクスの解析」
4. 文部科学省 科学研究費 特別推進研究、庄司光男 (分担)、沈建仁 (代表)、2022-2026 年度、7,000 千円「光合成における光誘導水分解反応機構及び光エネルギー利用機構の解明」
5. 文部科学省 科学研究費 基盤研究(A)、庄司光男 (分担) 上野博史 (代表)、2022-2025 年度、500 千円「XFEL-SFX による化学反応解明を目指した「反応追跡結晶」の構築」
6. 文部科学省 科学研究費 基盤研究(C)、庄司光男 (分担) 長友重紀 (代表)、2022-2025 年度、200 千円「ヘモグロビンの hinge と switch 領域構造の形成に関わる α 鎖と β 鎖の寄与の検証」
7. 文部科学省 科学研究費 基盤研究(A)、K. Hengphasatporn (分担)、2021-2026 年度、1,000 千円「Novel signal regulation by G protein supersulfidation and its physiological role」

8. 日本学術振興会 科学研究費 基盤研究 (B)、谷一寿、分担、2024-2027 年度、400 千円、「ユビキチンリガーゼが制御する病原菌感染と生体防御応答の構造生物学的解析」
9. AMED・生命科学・創薬研究支援基盤事業(BINDS)、谷一寿、分担、2022-2026 年度、14,900 千円、「クライオ電子顕微鏡によるタンパク質等構造解析と細胞内微細構造観察の支援～生命科学・創薬研究・国際的人材育成への貢献」
10. 日本学術振興会 科学研究費 挑戦的研究 (萌芽)、原田 隆平、分担、2023-2025 年度、750 千円、「Rubisco を改良する構造的要因の決定」

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. E.R. Sukandar, N. Darai, J. Chatwichien, S. Wongsuwan, S. Kaennakam, T. Pattarakankul, R. Purbowati, T. Ersam, S. Tip-pyang, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, P. Kueanjinda, T. Palaga, W. Chavasiri, T. Rungrotmongkol, C. Aonbangkhen, “Discovery of anti-inflammatory compounds from the stem bark of *Garcinia latissima* through in vitro and in silico approaches”, *Scientific Reports* (2025). DOI: 10.1038/s41598-025-30017-1.
2. J. Kerdsiri, K. Hengphasatporn, T. Pitaksuteepong, N. Nuengchamnong, A. Suroengrit, P. Chupinidsakulwong, Y. Shigeta, P. Bhattarakosol, S. Boonyasuppayakorn, N. Waranuch “*In silico* and bioassay-guided identification of potential anti-SARS-CoV-2 biomarkers from *Andrographis paniculata* extract”, *Computational and Structural Biotechnology Journal* **27**, 5479-5492 (2025). DOI: 10.1016/j.csbj.2025.11.050.
3. M. Ratanasak, Y. Hori, K. Sato, Y. Shigeta, “DFT study of boric acid-promoted thioester hydrolysis”, *Journal of Physical Chemistry A* **129**(48), 11171–11178 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpca.5c06672
4. N. Watanabe, Y. Hori, K. Okazawa, Y. Shigeta, M. Shoji, “Adsorption Nature of Amino Acids and Precursors on Interstellar Amorphous Solid Water”, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society* **544**(4), 3173–3179 (2025). DOI: 10.1093/mnras/staf1913
5. S. Timjan, K. Hengphasatporn, J. Inprasit, K. Ingkaninan, Y. Shigeta, N. Tanuphol, P. Temkitthawon, "Comprehensive Evaluation of *Tectona grandis* L.f.: Integrated *In Vitro* and *In Silico* Analysis of Steroid 5 α -Reductase Inhibition and Anti-Inflammatory Properties", *ACS Omega* **10**(48) 58456–58464 (2025). DOI:10.1021/acsomega.5c06183
6. M. Yoshida, N. Muraki, M. Tajiri, K. Hengphasatporn, K. Sue, T. Kubo, S. Akashi, Y. Shigeta, T. Kambe, Y. Furukawa, “Oxidative denaturation of Cu/Zn-superoxide dismutase associated with neurodegenerative diseases”, *Protein Science* **34**, e70339 (15 pages) (2025). DOI: 10.1002/pro.70339
7. P Apilardmongkol, M Ratanasak, V Parasuk, Y Shigeta, “DFT study of the origin of enantioselectivity of Ni-catalyzed asymmetric hydrogenation of cyclic sulfamidate imine to

- chiral cyclic sulfamidates”, *Computational and Theoretical Chemistry* **1252**, 115401 (2025). DOI:
8. D. Kovanich, K. Ketsuwan, K. Hengphasatporn, C. Thepparit, P. Sittipaisankul, P. Wongkongkathap, C. Sirisereewan, N. Techakriengkrai, T. Nedumpun, Y. Shigeta, T. Pisitkun, S. Suradhat, “Analysis of the Porcine Reproductive and Respiratory Syndrome Virus Nucleocapsid Interactome” *Journal of Proteome Research* **24**(11), 5390–5411 (2025). DOI:10.1021/acs.jproteome.5c00121
 9. Y. Harashima, T. Miyake, R. Baba, T. Takayama, S. Takasuka, Y. Shigeta, Y. Yamaguchi, A. Kudo, M. Fujii, “Covariance Linkage Assimilation method for Unobserved Data Exploration”, *Physical Review Materials* **9**, 093803 (9 pages) (2025). DOI:10.1103/8tjv-wtx5
 10. K. Kadota, S. Matsui, A. Traverson, Y. Hori, K. Sotho, K. Morisato, Y. Shigeta, Y. Nishiyama, S. Horike, “Coordination-Driven Tuning of CO₂ Release in Carbonate-Based Coordination Polymers”, *Journal of the American Chemical Society* **147** (33), 30022–30029 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c07425
 11. D. Yamada, A. Kadono, T. Maeno, T. Hamamura, Y. Shigeta, J. Yamamoto, M. Kubo, “Infrared and Ultraviolet Spectroscopic Characterization of a Key Intermediate in DNA Repair by (6-4) Photolyase”, *Communications Chemistry* **8**, Article number 256 (6 pages) (2025). DOI: 10.1038/s42004-025-01625-9
 12. T.L.D. Cao, K. Kawanishi, Y. Okita, Y. Watanabe, S. Hashimoto, K. Hengphasatporn, C. Nagai-Okatani, T. Kimura, M. Abdel-Aziz, R. Shiratani, T. Poullikkas, N.U. Azmi, H. Bando, S. Yamazaki, Y. Shigeta, A. Kuno, M. Kato, “Tumor-expressed GPNMB orchestrates Siglec-9+ TAM polarization and EMT to promote metastasis in triple-negative breast cancer”, *Proceeding of the National Academy of Society U.S.A* **122**(36), e2503081122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2503081122
 13. C. Orji, N. Loeanurit, T.-H.-T. Phan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, A. Merits, N. Wacharachaisurapol, W. Eiamart, S. Wittayalertpanya, A. Leelahavanichkul, T. Khotavivattana, W. Chavasiri, S. Boonyasuppayakorn, “Chlorinated biscoumarins inhibit chikungunya virus replication in cell-based and animal models”, *Emerging Microbes & Infections* **14**, 2529889 (17 pages) (2025). DOI: 10.1080/22221751.2025.2529889
 14. L. Duan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, “PaCS-Q: Python Toolkits for Path Sampling in MD and QM/MM MD Simulation”, *Journal of Chemical Information and Modeling* **65**(13), 6441–6445 (2025). DOI:10.1021/acs.jcim.5c00936
 15. V. Lakshmi, Y. Haketa, R. Sato, Y. Shigeta, H. Maeda, “Oligopyrrole-Based Anion-Responsive π -Electronic Systems That Exhibit Anion-Dependent Chiroptical Properties”, *The Journal of Organic Chemistry* **90**(26), 8879–8885 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c00482
 16. Y. Yuan, K. Motomura, J.-D. Kim, K. Hengphasatporn, K. Kako, S. Maruhashi, F. Kasai, H. Mizukami, S. Toma-Fukai, M. Muratani, Y. Shigeta, H. Daitoku, A. Fukamizu, “Protein arginine methylation regulates anti-inflammatory programming in response to aging stress”, *iScience* **28**(8), 113095 (17 pages) (2025). DOI: 10.1016/j.isci.2025.113095
 17. G. Kudo, T. Hirao, R. Harada, Y. Shigeta, T. Hirokawa, R. Yoshino, “Construction of PROTAC-Mediated Ternary Complex Structure Distribution Profiles Using Extensive Conformational Search”, *Journal of Chemical Information and Modeling* **65**(13), 6939–6948 (2025). DOI: 10.1021/acs.jcim.5c00102

18. T. Yasuda, Y. Okamoto, Y. Shigeta, R. Harada, “The Chemical Diversity in Chaperonin Contributes to Stabilization of Substrate Proteins Configurations”, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **16**, 6321–6327 (2025). DOI: acs.jpcclett.5c00855
19. P. Thitayanuwat, K. Hengphasatporn, S. Chankhamhaengdech, Y. Shigeta, “Mechanistic Insights into PRRSV Inhibition through CD163–SRCR5 Blockade by PRRSV/CD163-IN-1”, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **16** (25), 6286–6292 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5c01528
20. T. Uda, R. Kato, Y. Shigeta, S. Hirota, J. Kobayashi, H. Yoshida, M. Tsuyuguchi, K. Hengphasatporn, M. Tsujita, H. Taguchi, E. Hifumi, “Structural and biochemical differences between non-catalytic and catalytic antibody”, *mAbs* **17**, 2503978 (2025). DOI:10.1080/19420862.2025.2503978
21. P. Naweehattana, N. Kongkaew, P. Surawatanawong, N. Kungwan, Y. Fang, P. Wolschann, P. Maitarad, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, A. Vangnai, “Mechanistic Insights into Enhanced Reactivation of Organophosphate-Inhibited Enzymes by Methyl-Substituted 2-Pralidoxime Analogs”, *Journal of Physical Chemistry B* **129**(23), 5698–5706 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcb.5c01375
22. M. Sangkhawasi, W. Phothichaisri, R. Khumjiang, Y. Shigeta, C. Muanprasat, K. Hengphasatporn, T. Rungrotmongkol, “Identification of Novel TMEM16A Pore Blockers through Integrated Virtual Screening, Molecular Dynamics, and Experimental Studies”, *Scientific Reports* **15**, Article number: 15065 (11 pages) (2025). DOI:10.1038/s41598-025-99751-w
23. M.C. Manik, N. Darai, T. Rungrotmongkol, L. Duan, R. Harada, Y. Shigeta, K. Hengphasatporn, A.S. Vangnai, “Rationally designed antimicrobial peptides with high selectivity and efficiency against phytopathogenic *Ralstonia solanacearum*”, *Science of The Total Environment* **976**, 179354 (2025). DOI:10.1016/j.scitotenv.2025.179354
24. M. Ratanasak, Y. Hori, M. Shoji, Y. Shigeta, “Investigating the Photolysis Mechanism of Propylene Oxide using DFT and TD-DFT”, *ACS Omega* **10**(17), 17777–17782 (6 pages) (2025). DOI: 10.1021/acsomega.5c00265
25. L. Duan, K. Hengphasatporn, R. Harada, Y. Shigeta, “PaCS-Q: Enhanced Sampling Techniques in QM/MM Molecular Dynamics Simulations”, *Journal of Chemical Theory and Computation* **21**(8), 4309–4318 (2025). DOI: 10.1021/acs.jctc.5c00169
26. K. Obata, Y. Shigeta, R. Harada, “*In silico* analysis of inhibitor intrusion into the AQP7 channel for efficient drug design”, *Chemistry Letters* **54**(4), upaf063 (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf063
27. N. Koyanagi, K. Hengphasatporn, A. Kato, M. Nobe, K. Takeshima, Y. Maruzuru, K. Maenaka, Y. Shigeta, Y. Kawaguchi, “Regulatory Mimicry of Cyclin-Dependent Kinases by Conserved Herpesvirus Protein Kinases”, *Proceeding of the National Academy of Society U.S.A* **122**(16), e2500264122 (2025). DOI:10.1101/2023.10.18.563025
28. P. Yukhet, K. Faikhruea, R. Mowang, P. Naweewattana, M. Ratanasak, Y. Shigeta, T. Rungrotmongkol, C. Aonbangkhen, T. Vilaivan, “A Mild and Catalyst-Free Strategy for the Synthesis of Cannabidiol Derivatives and Regioisomers Using Fluorinated Alcohols as Solvents”, *Chemistry A Asian Journal* **20**, e202401648 (13 pages) (2025). DOI:10.1002/asia.202401648

29. M.K. Si, Y. Hori, Y. Shigeta, “Implications of Highly stable polycyanated tricyclic[10]annulene derivatives anions as efficient halogen-free electrolyte for Lithium and Sodium-ion Batteries”, *ChemPhysChem* **26**, 2401109 (2025). DOI:10.1002/cphc.202401109
30. Y. Shinkai, Y. Ding, T. Matsui, G. Devitt, M. Akiyama, T.-L. Shen, M. Nishida, T. Ida, T. Akaike, S. Mahajan, J.M. Fukuto, Y. Shigeta, Y. Kumagai, “Growth inhibitory factor/metallothionein-3 is a sulfane sulfur-binding protein”, *eLife*, 92120.3 (33 pages) (2025). DOI:10.7554/eLife.92120.2
31. S. Sinsulpsiri, Y. Nishii, Q.-F. Xu-Xu, M. Miura, P. Wilasluck, K. Salamteh, P. Deetanya, K. Wangkanont, A. Suroengrit, S. Boonyasuppayakorn, L. Duan, R. Harada, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, L. Shi, P. Maitarad, T. Rungrotmongkol, “Unveiling the Antiviral Inhibitory Activity of Ebselen and Ebsulfur Derivatives on SARS-CoV-2 Using Machine Learning-based QSAR, LB-PaCS-MD, and Experimental Assay”, *Scientific Reports* **15**, Article number: 6956 (12 pages) (12 pages) (2025). DOI:10.1038/s41598-025-91235-1
32. T. Nakamura, M. Kuwabara, H. Zhang, K. Okazawa, M. Boero, Y. Shigeta, T. Nabeshima, “Pseudo[3]rotaxane and [3]Rotaxane of Per-Carboxy Cyclodextrins Utilizing Carboxylic Acid Dimer as Recognition Units”, *The Journal of Organic Chemistry* **90**(12), 3603–3609 (2025). DOI:10.1021/acs.joc.4c02804
33. H. Zhang, J. Dong, X. Tang, N. Kishimoto, Y. Deng, H. Zhang, X. Yu, Y. Nakagawa, S. Zhang, Y. Kagotani, M. Adachi, Y. Zhou, Y. Kitahama, M. Marumi, L. Kacenauskaite, P.M. Pancorbo, Y. Shigeta, A. Iwasaki, Y. Ma, T.-H. Xiao, K. Goda, “Rational design and engineering of chemical enhancement in Raman scattering”, *Advanced Optical Materials* **13**(8), 2402673 (2025). DOI:10.1002/adom.202402673
34. G. Novientri, K. Takeda, L. Duan, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, C. Xie, T. Mashima, S. Hirota, “Apoprotein Intermolecular Interactions and Heme Insertion for 3D Domain Swapping in Heme Proteins”, *ACS Omega* **10**(7), 7039–7047 (2025). DOI:10.1021/acsomega.4c09948
35. K. Yoneda, C. Kobayashi, H. Araie, R. Morita, R. Harada, Y. Shigeta, H. Endo, Y. Maeda, I. Suzuki, “Characterization of delta-7 alkenone desaturase in haptophytes *Emiliania huxleyi* through the heterologous expression in *Tisochrysis lutea*”, *Marine Biotechnology* **27**, Article No. 44 (8 pages) (2025). DOI:10.1007/s10126-025-10427-y
36. T. Panklai, P. Temkitthawon, N. Suphrom, C. Girard, P. Totoson, K. Hengphasatporn, Y. Shigeta, K. Chootip, K. Ingkaninan, “*Nymphaea pubescens* Willd. extract and its flavonoid constituents vasodilate rat isolated pulmonary artery via NO-sGC-cGMP pathway”, *Phytomedicine Plus* **5**(1), 100733(2025). DOI:10.1016/j.phyplu.2025.100733
37. C. Chandit, K. Hengphasatporn, P. Donsuy, Y. Shigeta, K. Wangkanont, “Structure and catalytic activity of a dihydrofolate reductase-like enzyme from *Leptospira interrogans*”, *International Journal of Biological Macromolecules* **298**, 139931 (8 pages) (2025). DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2025.139931
38. K. Sanachai, K. Hengphasatporn, S. Chamni, K. Suwanborirux, P. Mahalapbutr, Y. Shigeta, S. Seetaha, K. Choowongkamon, T. Rungrotmongkol, “Exploring Mimosamycin as a Janus Kinase 2 Inhibitor: A Combined Computational and Experimental Investigation”, *Computational Biology and Chemistry* **115**, 108346 (10 pages) (2025). DOI: 10.1016/j.compbiolchem.2025.108346

39. N. Watanabe, Y. Komatsu, Y. Hori, Y. Shigeta, M. Shoji, “Enantioselective interactions of aminonitrile dimers”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **27**, 340-345 (2025). DOI: 10.1039/D4CP02579B
40. S. Kongkaew, M. Ratanasak, Y. Shigeta, J. Hasegawa, V. Parasuk, “Theoretical investigation of sustainable CO₂ electroreduction to high-value products utilizing N-doped/BN-modified Triphenylene-Graphdiyne”, *Fuel* **379**, 133102 (11 pages) (2025). DOI: 10.1016/j.fuel.2024.133102
41. P. Apilardmongkol, M. Ratanasak, T. Chokbunpiam, F. Mulya, W. Santiwarodom, T. Kuamit, Y. Shigeta, J. Hasegawa, V. Parasuk, “Theoretical design of higher performance catalysts for ethylene polymerization based on nickel- α -diimine”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **27**, 14613-14623 (2025). DOI: 10.1039/D5CP01320H
42. A. Nishimura, S. Ogata, X. Tang, K. Hengphasatporn, K. Umezawa, M. Sanbo, M. Hirabayashi, Y. Kato, Y. Ibuki, Y. Kumagai, K. Kobayashi, Y. Kanda, Y. Urano, Y. Shigeta, T. Akaike, M. Nishida, “Polysulfur-based bulking of dynamin-related protein 1 prevents ischemic sulfide catabolism and heart failure in mice”, *Nature Communications* **16**, Article number 276 (17 pages) (2025). DOI:10.1038/s41467-024-55661-5
43. Y. Kimura*, R. Kanno, K. Mori, Y. Matsuda, R. Seto, S. Takenaka, H. Mino, T. Ohkubo, M. Honda, Y.C. Sasaki, J. Kishikawa, K. Mitsuoka, K. Mio, M. Hall, E.R. Purba, T. Mochizuki, A. Mizoguchi, B.M. Humbel, M.T. Madigan, Z.-Y. Wang-Otomo*, K. Tani*, “The Thermal-Stable LH1–RC Complex of a Hot Spring Purple Bacterium Powers Photosynthesis with Extremely Low-Energy Near-Infrared Light”, *Biochemistry*, **64**, 170-179 (2025). DOI:10.1021/acs.biochem.4c00506.
44. K. Tani*, R. Kanno, K.V.P. Nagashima, M. Kawakami, N. Hiwatashi, K. Nakata, S. Nagashima, K. Inoue, S. Takaichi, E.R. Purba, M. Hall, L.-J. Yu, M.T. Madigan, A. Mizoguchi, B.M. Humbel, Y. Kimura*, Z.-Y. Wang-Otomo*, “A Native LH1–RC–HiPIP Supercomplex from an Extremophilic Phototroph”, *Communications Biology*, **8**, 42 (2025). DOI:10.1038/s42003-024-07421-w
45. K. Tani*, K.P.V. Nagashima, R. Kojima, M. Kondo, R. Kanno, I. Satoh, M. Kawakami, N. Hiwatashi, K. Nakata, S. Nagashima, K. Inoue, Y. Isawa, R. Morishita, S. Takaichi, E.R. Purba, M. Hall, L.-J. Yu, M.T. Madigan, A. Mizoguchi, B.M. Humbel, Y. Kimura*, Y. Nagasawa*, T. Dewa*, Z.-Y. Wang-Otomo*, “A distinct double-ring LH1–LH2 photocomplex from an extremophilic phototroph”, *Nature Communications*, **16**, 1410 (2025). DOI:10.1038/s41467-024-55811-9
46. K. Tani*, R. Kanno, M. Inami, T. Ooya, R. Matsushita, K. Inada, S. Takenaka, S. Takaichi, E. R. Purba, M. Hall, T. Mochizuki, L.-J. Yu, A. Mizoguchi, B. M. Humbel, M. T. Madigan, Y. Kimura*, Z.-Y. Wang-Otomo*, Structure and Biochemistry of the LH1-RC Photocomplex from the Halophilic Purple Bacterium, *Rhodothalassium salexigens.*, *Biochemistry*, **64**, 3070-3080 (2025). DOI: 10.1021/acs.biochem.5c00181
47. Yue X.-Y., Wang G.-L., Kosaki S., Nagashima K.V.P., Wu Y.-L., Kobayashi Y., Sugiyama T., Kanno R., Purba E.R., Takaichi S., Mochizuki T., Mizoguchi A., Humbel B.M., Madigan M.T., Mino H., Tani K.*, Kimura Y.*, Wang-Otomo Z.-Y.*, Yu L.-J.*, Structural Insights into the Photochemistry of the LH1–RC Complex from the Marine Purple Phototrophic

- Bacterium, *Rhodovulum sulfidophilum*, *Communications Biology*, 9, 502 (2026). DOI:10.1038/s42003-026-09755-z
48. Tani K.*, Kanno R., Inami M., Ooya T., Matsushita R., Inada K., Takenaka S., Takaichi S., Purba ER., Hall M., Mochizuki T., Yu L.-J., Mizoguchi A., Humbel B.M., Madigan M.T., Kimura Y.*, Wang-Otomo Z.-Y.*, Structure and Biochemistry of the LH1-RC Photocomplex from the Halophilic Purple Bacterium, *Rhodospirillum rubrum*, *Biochemistry*, **64**, 3070-3080 (2025). DOI:10.1021/acs.biochem.5c00181
 49. M. Endo, T. Yasuda, R. Morita, T. Mizuno, K. Irie, R. Harada, “Phosphorylation at the N-Terminal in Hmt1 Enhances Dimerization by Exposing the Binding Surface”, *The Journal of Physical Chemistry B*, **30**(2), 723–729 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07597
 50. S. Takeo, M. Takeda, C. Iio, A. Sakakibara, S. Saha, N. Shibata, Y. Yamazaki, T. Fujii, R. Harada, K. Sato, N. Mase, M. Watanabe, T. Oyoshi. T. Narumi, “Amide-to-Chloroalkene Substitution for Peptide Backbone Modification to Enhance Membrane Permeability”, *Journal of Medicinal Chemistry*, **69**, 6440–6460 (2026). DOI:10.1021/acs.jmedchem.5c02090
 51. S. Ishida, K. Miyagawa, M. Shoji, "Density functional theory insights into the formation mechanisms and reaction rates of Strecker aldehydes", *RSC Advances* **15**(55), 46959-46966 (2025). DOI: 10.1039/D5RA07604H
 52. S. Ishida, E. Xie, D. Iwata, K. Miyagawa, M. Shoji, "Comparison of theoretical methods for calculating Strecker degradation", *Chemistry Letters* **54**(11), (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf202

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. Yasuteru Shigeta, “Computational studies on structure-function relationship of metalloproteins”, *Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists* (APATCC11), Apr. 21st-25th 2025, Kobe, Japan.
2. Kowit Hengphasatporn, 10th Japan-Taiwan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2025 at Yokohama City University, Japan (invited talk), 2025/05/31
3. Yasuteru Shigeta, ACC2025, Thailand, 2025/06/23-27
4. Yasuteru Shigeta, “A novel enzymatic reaction mechanism analysis method using QM/MM MD”, *20th Asian Chemistry Congress* (AsiaChem 2025), June 23rd-27th, Bangkok, Thailand.
5. Yasuteru Shigeta, “Computational studies on structure-function relationship of metalloproteins”, *Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists* (APATCC11), Apr. 21st-25th 2025, Kobe, Japan.
6. Kowit Hengphasatporn, Lian Duan, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta. “PaCS-Q: Python Toolkits for Path Sampling in MD and QM/MM MD Simulation”, the 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE28), Jul 30, 2025

7. Yasuteru Shigeta, “Integrated computational chemistry methods for protein function analysis and drug discovery” (Plenary Talk), Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2025 (AHeDD2025), Sep. 23rd-25th 2025, Hangzhou, CHINA.
8. Kowit Hengphasatporn, R. Harada, Y. Shigeta, “Ligand-binding parallel cascade selection molecular dynamics simulation for drug discovery”, Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2025 (AHeDD2025), Sep. 23rd-25th 2025, Hangzhou, CHINA.
9. Kowit Hengphasatporn, L. Duan, R. Harada, Y. Shigeta, “Tracking How Drugs Bind: LB-PaCS-MD for Pathways, FMO for Interactions, and PaCS-Q for Covalent Mechanisms”, Institute of Chemistry, Aug. 11th, 2025, Academia Sinica, TAIWAN
10. Yasuteru Shigeta, “A novel enzymatic reaction mechanism analysis method using QM/MM MD”, *Pacificchem* 2025, Dec 15th -20th2025, Hawaii, USA.
11. Yasuteru Shigeta, “A novel enzymatic reaction mechanism analysis method using QM/MM MD”, *International Conference on Modeling Chemical and Biological (Re)Activity (MCBR-2025)*, Dec 11th – 14th 2025, Hyderabad, India.
12. Kowit Hengphasatporn, Y. Shigeta, “FMO-guided drug discovery and design”, PACCON2026, Thailand, Feb. 12, 2026
13. Kowit Hengphasatporn, "Advancements in Biological Function and Information Development", National Taiwan Normal University, Taiwan, Mar. 27, 2026
14. Kowit Hengphasatporn, Yasuteru Shigeta, FMO-guided drug discovery and design, National Yang Ming Chiao Tung University, Mar. 30, 2026
15. Ryuhei Harada, “Simple yet Powerful Rare-Event Sampling Methods (PaCS-MD/OFLOOD) for Elucidating Membrane Permeation Processes of Drugs”, *Pacificchem* 2025, Dec. 15, 2025

B) 一般講演

1. Lian Duan, Kowit Hengphasatporn, Marko Hanzevacki, Adrian Mulholland, Takehiko Tosha, Yasuteru Shigeta. “Proton transfer and catalysis in cytochrome c type nitric oxide reductase: integrated QM/MM and MD simulations,” (**Oral**), the 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE28), Jul 31, 2025
2. Kowit Hengphasatporn, Lian Duan, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, “PaCS-Q: Python Toolkits for Path Sampling in MD and QM/MM MD Simulation” (Invited talk), Drug Discovery and Design using machine learning and computational methods. Aug. 8th, Institute for Advanced Study in Technology (IAST), Ton Duc Thang University, VIETNAM (online)
3. Kowit Hengphasatporn, “Molecular docking on the cloud”, University of Malaya, Malaysia, Mar. 12-13, 2026
4. Kowit Hengphasatporn, Lian Duan, Yasuteru Shigeta, “Cloud-Ready Distance-Guided Fully Dynamic Docking of Host–Guest Complexes”, CSJ2026, Japan, Mar. 19, 2026 (oral)
5. Mitsuo Shoji, Reconstruction of the Mn cluster in photosystem II, The 3rd meeting of the Generative Design to Unlock the Potential of Protein Function (PGFD) in Grant-in-Aid for Transformative Research Areas A, Acurier Himeji, Hyogo, 2025/6/16-18 (oral)
6. Mitsuo Shoji, Water Oxidation Reactions in Natural and Artificial photosynthesis, the 11th Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC11), Kobe international conference center, kobe, 2025/4/21-25 (oral)

7. Wanda Destiarani, Kowit Hengphasatporn, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, “Computational Insights into the pH-dependent Antibody Behavior of Ipilimumab – CTLA-4: A Switchable Antibody”, ISFMS2025-The 5th International Symposium on Frontiers in Molecular Science, Kyoto, 2025/8/26-29 (poster)
8. Wanda Destiarani, Kowit Hengphasatporn, Yasuteru Shigeta, Ryuhei Harada, “Computational Insights into the pH-dependent Antibody Behavior of Ipilimumab – CTLA-4: A Switchable Antibody”, The 12th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium Hong-Kong, 2026/1/12-14 (poster)

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 谷 一寿、クライオ電子顕微鏡データから拓く創薬・生命科学シードの創出、計算メディカルサイエンス事業部公開シンポジウム 2025、2025/12/23
2. Kowit Hengphasatporn、有機分子変換化学セミナー、2025/06/2
3. 重田 育照、“統合的計算化学研究手法による生命機能の解明と制御”、第 19 回分子科学討論会、広島国際会議場、2025/9/9-12
4. 庄司 光男、アミノ酸のホモキラリティ起源と増幅機構、第 1 回 GHZ meeting、筑波大 CCS、2026/2/16
5. 庄司 光男、アミノ酸のホモキラリティ起源についての理論的探求、第 2 回有機無機量子スピンサイエンス・テクノロジー研究会、ホテル日航、つくば、2025/12/22
6. 庄司 光男、2050 年の生体分子科学の理論研究を予測する、分子研研究会「2050 年の生体分子科学を語る」、分子研、岡崎、2025/10/21-22

その他の発表

1. Kowit Hengphasatporn, Yasuteru Shigeta, “FMO and ML-guided design of potent darunavir analogs targeting HIV-1 protease” (Poster), Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2025 (AHeDD2025), Sep. 23rd-25th 2025, Hangzhou, China
2. Kowit Hengphasatporn, “フラグメント分子軌道法「FMO」を基盤とした分子相互作用解析と創薬への応用” (ポスター発表) 豊田理研異分野若手交流会、Sep. 2nd-3rd、Nagoya、Japan
3. Lian Duan, Kowit Hengphasatporn, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, “PaCS-Q: Python Toolkits for Path Sampling in MD and QM/MM MD Simulation” (Poster), Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2025 (AHeDD2025), Sep. 23rd-25th 2025, Hangzhou, CHINA. L. Duan, Y. Shigeta, “3DDS domain swapping” (Poster Presentation) Mesohie meeting, Nov. 6-8, 2025, Ehime, Japan
4. Kowit Hengphasatporn, Y. Shigeta, “Computational Analysis on Structural Diversity of Cytochrome c Domain-Swapping Dimers” (Oral), CREST Meeting, Jan. 9–10, 2026, Oita, Japan
5. Kowit Hengphasatporn, Y. Shigeta, “Computational Techniques for Sulfur-Containing” (Poster), Academic Transformation Area (A) “Sulfur Biology”, Miyabi, Jan. 12–14, 2026

6. Lian Duan, Kowit Hengphasatporn, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, “PaCS-Q for Efficient Reaction Mechanism Exploration” (Poster), CCS-D³ Bridge 2026: Connecting JP-UK+ — JP-UK Symposium on Computational Drug Discovery and Design, Jan. 20–23, 2026, Tsukuba, Japan
7. Yukihiro Kimura, Kazutoshi Tani, Kenji V.P. Nagashima, Risa Kojima, Masaharu Kondo, Ryo Kanno, Issei Satoh, Mai Kawakami, Naho Hiwatashi, Kazuna Nakata, Sakiko Nagashima, Kazuhito Inoue, Yugo Isawa, Ryoga Morishita, Shinichi Takaichi, Endang R. Purba, Malgorzata Hall, Long-Jiang Yu, Michael T. Madigan, Akira Mizoguchi, Bruno M. Humbel, Yutaka Nagasawa, Takehisa Dewa, Zheng-Yu Wang-Otomo, “Characterization of light-harvesting complexes from extremely Halophilic purple sulfur bacteria”, 40th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2025/6/5, Kobe
8. 松本 夏弥、石場 智彬、原田 彩佳、谷 一寿、岩崎 憲治、野生型と一残基変異型サブユニットからなる二量体がん関連酵素のクライオ電子顕微鏡単粒子解析、第 23 回日本蛋白質科学会年会、2025/6/14、つくば (優秀ポスター賞)
9. 平山 詩恩、松原 幸希、谷 一寿、島田 敦広、Purification and Crystallization of Cytochrome c Oxidase from Bovine Liver、AsCA2025、2025/12/2、台湾
10. 平山 詩恩、松原 幸希、谷 一寿、島田 敦広、立体構造解明に向けた肝臓由来シトクロム c 酸化酵素の精製、第 51 回日本生体エネルギー研究会、2025/12/11、柏
11. 慈幸千 真理、舟越 俊介、谷 一寿、栗栖 源嗣、吉田 善紀、ヒト iPS 細胞由来心筋細胞を用いた ATP 合成酵素の自己組織化解明、第 51 回日本生体エネルギー研究会、2025/12/11、柏

(4) 著書、解説記事等

該当なし

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

異分野間連携（センター内外）

該当なし

産学官連携

該当なし

国際連携・国際活動

該当なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

世話人：庄司 光男、金子 邦彦 先生、特別講演会：生命とは何か・普遍生物学、筑波大学計算科学研究センター ワークショップ室、2026/2/20

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

重田育照

日本化学会 理論化学・情報化学・計算化学ディビジョンレポート 幹事 (2019-)

理論化学会幹事 (2021-)

分子科学会プログラム委員 (2016-)

日本コンピュータ化学会役員 (2021-)

量子生命科学会評議員 (2021-)

NISTEP 専門調査員 (2020-)

大阪大学 大学院基礎工学研究科 招聘教授 (2015-)

10. 社会貢献・国際貢献

該当なし

11. その他

該当なし