

平成28年度医療研究開発推進事業費補助金
(創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業) 補助事業成果報告書

I. 基本情報

事業名：創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業（創薬等支援技術基盤プラットフォーム事業）
Platform Project for Supporting Drug Discovery and Life Science Research
(Platform for Drug discovery, Informatics, and Structural life science)

補助事業課題名：（日本語）分子動力学計算による各種構造生物学データを活用した生体分子構造機能解析
（英語） Biomolecular Function Analysis using Molecular Dynamics Simulations
in Combination with Structural Biology Data

補助事業担当者 （日本語）横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授 池口満徳

所属 役職 氏名：（英語）Mitsunori Ikeguchi, Professor, Graduate School of Medical Life Science,
Yokohama City University

実施期間： 平成 28 年 4 月 1 日 ～ 平成 29 年 3 月 31 日

II. 成果の概要（総括研究報告）

本事業では、スーパーコンピュータ等を用いた大規模な分子動力学計算を用い、X 線小角散乱や NMR、イオンモビリティ質量分析などの各種構造生物学データを活用して生体分子構造機能解析を行った。支援研究と高度化研究からなり、横浜市立大学に設置してある超並列スーパーコンピュータ CRAY XE6 等を用いて分子動力学シミュレーションを実施し、各種構造生物実験データを参照しながら溶液中における構造モデリングの研究を行った。支援研究に関しては以下を含む 12 件の研究を実施した。

千葉大学の村田武士先生への支援研究では、膜超分子モーターである V 型 ATPase について、最近決定された X 線結晶構造に基づき、全原子分子動力学シミュレーションと粗視化分子動力学シミュレーションを組み合わせたマルチスケール分子動力学シミュレーションを用いて、軸回転メカニズムの解明を行った。

東京工業大学の村上聡先生への支援研究では、多剤排出トランスポーターAcrBについて、全原子分子動力学シミュレーションを行い、薬剤排出プロセスの解明を行った。さらに、我々のグループで開発された構造比較の手法である Motion Tree 法を適用し、AcrB の立体構造変化を解析した。

横浜市立大学の西村善文先生への支援研究では、ヘテロクロマチン形成因子 HP1 クロモドメインとヒストンテイルのレプリカ交換分子動力学シミュレーションを実施し、HP1 のリン酸化による HP1 とヒストンテイル間の相互作用への影響を調べた。

昭和薬科大学の伊藤俊将先生への支援研究では、創薬ターゲットであるビタミン D 受容体のリガンド結合ドメインにおける、非結合型とアンタゴニスト結合型の溶液構造について、全原子分子動力学シミュレーションを実施し、X 線小角散乱実験データを参照しながら分子モデリングを行い、ビタミン D 受容体の機能発現モデルを提案した。以上の他、8 件の支援研究を実施した。

高度化研究としては、NMR、イオンモビリティ質量分析、X 線小角散乱など、構造生物学の実験データを活用した計算手法などの研究開発を行った。NMR との連携では、横浜市立大学西村善文教授のグループと連携して、エピゲノムなど高等生物の遺伝子の発現機構に重要な役割を果たしているヒストン多量体について、NMR の化学シフトをもとに、構造モデリングを行う方法を開発した。X 線小角散乱実験 (SAXS) との連携においては、大規模な構造変化のある場合に対応するために、粗視化 MD-SAXS の開発も実施した。さらに、薬剤の結合自由エネルギーの高精度計算のために、新たな溶媒和自由エネルギー計算法の開発、構造エントロピー計算法の開発も行った。

In this project, large-scale molecular dynamics (MD) simulations for proteins were performed using supercomputers in order to elucidate their dynamic functions in conjunction with structural-biology data such as small-angle x-ray scattering (SAXS), nuclear magnetic resonance (NMR) and ion mobility mass spectrometry (IMMS). This project was composed of studies supporting other researchers using our MD techniques and the improvements of our technologies. In our MD simulations, supercomputer CRAY XE6 installed in Yokohama City University was utilized substantially. Solution structures of proteins were investigated using MD simulations in combination with structural-biology data. Twelve studies supporting other researchers were performed in this project.

In the study supporting Prof. Murata of Chiba University, multiscale MD simulations in which all-atom and coarse-grained MD simulations were combined were carried out for the membrane supramolecular system, V-type ATPase from recently determined crystal structures. The molecular mechanism underlying rotary motions of V-type ATPase was elucidated on the basis of results of the MD simulations.

In the study supporting Prof. Murakami of Tokyo Institute of Technology, all-atom MD simulations for multidrug efflux transporter AcrB were performed, and the mechanism underlying the multidrug efflux of AcrB was investigated. Further, the motion tree method,

which has been developed by our group, was applied to AcrB for understanding conformational changes in AcrB.

In the study supporting Prof. Nishimura of Yokohama City University, replica-exchange MD simulations for the chromo domain of heterochromatin protein 1 (HP1) and histone tail were performed to analyze the effects of the HP1 phosphorylation on the interaction between HP1 and the histone tail.

In the study supporting Prof. Ito of Showa Pharmaceutical University, all-atom MD simulations for the ligand-binding domain of the Vitamin D receptor in antagonist-bound and free forms were performed. From the results of the MD simulations and SAXS data, a function model of Vitamin D receptor was proposed. Eight other supporting studies were performed in this project.

As for improvements of our technologies, computational methods of molecular modeling using MD simulations in combination with structural biology data such as SAXS, NMR and IMMS had been developed. In collaboration with the group of Prof. Nishimura of Yokohama City University, a computational method to determine solution structures from NMR chemical shifts was developed and was applied to the H2A/H2B dimer of histones. To model substantially flexible proteins such as intrinsically disordered proteins, coarse-grained MD simulations were combined with SAXS data. Further, to accurately predict binding free energies of ligands to proteins, computational methods for hydration free energies and configurational entropies of ligands and proteins were developed in this project.

III. 成果の外部への発表

(1) 学会誌・雑誌等における論文一覧 (国内誌 4 件、国際誌 17 件)

1. SAIKUSA K, KUWABARA N, KOKABU Y, INOUE Y, SATO M, IWASAKI H, SHIMIZU T, IKEGUCHI M, AKASHI S. Characterisation of an intrinsically disordered protein complex of Swi5-Sfr1 by ion mobility mass spectrometry and small-angle X-ray scattering. *Analyst*. 2013, 138, 1441-9.
2. KOKABU Y, IKEGUCHI M. Molecular modeling and molecular dynamics simulations of recombinase Rad51. *Biophys. J.* 2013, 104, 1556-65.
3. ITO Y, YOSHIDOME T, MATUBAYASI N, KINOSHITA M, IKEGUCHI M. Molecular dynamics simulations of yeast F1-ATPase before and after 16-degree rotation of the γ subunit. *J. Phys. Chem. B.* 2013, 117, 3298-307.
4. SAIKUSA K, FUCHIGAMI S, TAKAHASHI K, ASANO Y, NAGADOI A, H. TACHIWANA, KURUMIZAKA H, IKEGUCHI M, NISHIMURA Y, AKASHI S. Gas-phase structure of the

histone multimers characterized by ion mobility mass spectrometry and molecular dynamics simulation. Anal. Chem. 2013, 85, 4165-71.

5. YAMANE T, MURAKAMI S, IKEGUCHI M. Functional rotation induced by alternating protonation states in the multidrug transporter AcrB: All-atom molecular dynamics simulations. Biochemistry, 2013, 52, 7648-58.
6. 池口満徳, 山根努. 生体系の分子シミュレーションと多剤排出トランスポーターへの応用. 実験医学増刊 構造生命科学で何がわかるのか何ができるのか, 2014, 32, 64-7.
7. 伊藤祐子, 池口満徳. 全原子分子動力学計算が解き明かす回転分子モーターの作用機構. 1 分子ナノバイオ計測, 化学同人, 2014, 99-109.
8. ITO Y, IKEGUCHI M. Mechanism of the $\alpha\beta$ conformational change in F₁-ATPase after ATP hydrolysis: free energy simulations. Biophys. J. 2015, 108, 85-97.
9. EKIMOTO T, MATUBAYASI N, IKEGUCHI M. Finite-size effect on the charging free energy of protein in explicit solvent. J. Chem. Theory Comput. 2015, 11, 215-23.
10. YOSHIDOME T, EKIMOTO T, MATUBAYASI N, HARANO Y, KINOSHITA M, IKEGUCHI M. An accurate and efficient computation method of the hydration free energy of a large, complex molecule. J. Chem. Phys. 2015, 142, 175101,1-11.
11. MORITSUGU K, KOIKE R, YAMADA K, KATO H, KIDERA A. Motion Tree delineates hierarchical structure of protein dynamics observed in molecular dynamics simulation. PLoS ONE 10 2015, e0131583 1-13.
12. 伊藤祐子, 池口満徳. 全原子分子動力学計算が解き明かす分子モーターの回転機構,生物物理, 2015, 55, 23-6.
13. 村上聡, 山根努, 池口満徳, 高田彰二. 計算科学と実験科学の組み合わせにより明らかになった多剤排出トランスポーターAcrBの分子メカニズム, 生物物理, 2015, 55, 27-30
14. MORITSUGU K, TERADA T, KIDERA A. Multiscale enhanced sampling for protein systems: An extension via adiabatic separation. Chem. Phys. Lett. 2016, 661, 279-83.
15. SHIMOJO H, KAWAGUCHI A, ODA T, HASHIGUCHI N, OMORI S, MORITSUGU K, KIDERA A, HIRAGAMI-HAMADA K, NAKAYAMA J, SATO M, NISHIMURA Y. Extended string-like binding of the phosphorylated HP1 α N-terminal tail to the lysine 9-methylated histone H3 tail, Sci. Rep. 2016, 6, 22527 1-15.
16. MORIYAKI Y, YAMANE T, OHTOMO H, IKEGUCHI M, KURITA J, SATO M, NAGADOI A, SHIMOJO H, NISHIMURA Y. Solution structure of the isolated histone H2A-H2B heterodimer, Sci. Rep. 2016, 6, 24999, 1-11.
17. KUWABARA N, MANYA H, YAMADA T, TATENO H, KANAGAWA M, KOBAYASHI K, AKASAKA-MANYA K, HIROSE Y, MIZUNO M, IKEGUCHI M, TODA T, HIRABAYASHI J, SENDA T, ENDO T, KATO R. Carbohydrate-binding domain of the POMGnT1 stem region modulates O-mannosylation sites of α -dystroglycan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2016, 113, 9280-5.
18. ANAMI Y, SHIMIZU N, EKIMOTO T, EGAWA D, ITOH T, IKEGUCHI M, YAMAMOTO K. Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain revealed by hybrid approach combining small-angle x-ray scattering and molecular dynamics, J. Med. Chem. 2016, 59, 7888-900.

19. HIKIRI S, YOSHIKOME T, IKEGUCHI M. Computational methods for configurational entropy using internal and Cartesian coordinates, J. Chem. Theory Comput. 2016, 12, 5990-6000.
20. MORITSUGU K, TERADA T, KIDERA A. Free energy landscape of protein-ligand interactions coupled with protein structural changes. J. Phys. Chem. B 2017, 121, 731-40.
21. ISAKA Y, EKIMOTO T, KOKABU Y, YAMATO I, MURATA T, IKEGUCHI M. Rotation mechanism of molecular motor V_1 -ATPase studied by multiscale molecular dynamics simulation, Biophys. J. 2017, 112, 911-20.

(2) 学会・シンポジウム等における口頭・ポスター発表

1. Comparison of ssDNA- and dsDNA-binding affinity of RecA recombinase using the PBSA method. 口頭, Yuichi Kokabu, Mitsunori Ikeguchi, The 3rd International Conference on New frontier of the research in RecA-family recombinase and its accessory proteins, Nantes, France, 2013/10/3-5, 国外.
2. Protein structural fluctuations investigated by small-angle X-ray solution scattering and molecular dynamics simulations. 口頭, Tomotaka Oroguchi, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
3. All-atom hydration analysis of the β subunit in F_1 -ATPase, ポスター, Toru Ekimoto, Mitsunori Ikeguchi, Nobuyuki Matubayasi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
4. Comparison of ssDNA- and dsDNA-binding affinity of RecA recombinase using the PBSA method, ポスター, Yuichi Kokabu, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
5. Motion Tree analysis of the multidrug transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Ryotaro Koike, Motonori Ota, Satoshi Murakami, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
6. Rotation mechanism of V_1 -ATPase studied by steered MD simulations, ポスター, Yuta Isaka, Ichiro Yamato, Takeshi Murata, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
7. Comparison of calculation methods of configurational entropy from molecular dynamics simulation trajectories, ポスター, Simon Hikiri, Takashi Yoshidome, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
8. Free energy simulations for the conformational change of the $\alpha\beta$ subunits in F_1 -ATPase after the ATP hydrolysis, ポスター, Yuko Ito, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 51 回年会, 2013/10/28-30, 国内.
9. 創薬等 PF バイオインフォマティクス領域での創薬支援の紹介:シミュレーション関係の支援項目について, 口頭, 池口満徳, CBI 学会 2013 年大会, 2013/10/28-30, 国内.

10. Combination of Molecular Dynamics Simulations and Small-angle X-ray Scattering Experiments to Explore Protein Dynamics, 口頭, Mitsunori Ikeguchi, Workshop on Modeling Biomolecular Systems in Cellular Environments, 2013/10/31-11/1, 国内.
11. Combination of MD and SAXS to Explore Protein Dynamics, 口頭, 3rd International Conference on Molecular Simulation, Mitsunori Ikeguchi, 2013/11/18-20, 国内.
12. Finite size effect on the calculation of the charging free energy for protein systems, ポスター, Toru Ekimoto, Nobuyuki Matubayasi, Mitsunori Ikeguchi, 58th Annual Meeting of Biophysical Society, 2014/2/15-19, 国外.
13. Free energy simulations for the conformational change of the $\alpha\beta$ subunits in F_1 -ATPase after the ATP hydrolysis, ポスター, Yuko Ito, Mitsunori Ikeguchi, 58th Annual Meeting of Biophysical Society, 2014/2/15-19, 国外.
14. Motion tree analysis of multidrug efflux transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Satoshi Murakami, Mitsunori Ikeguchi, 58th Annual Meeting of Biophysical Society, 2014/2/15-19, 国外.
15. Structural characterization of the histone multimers in the gas phase using ion mobility mass spectrometry and molecular dynamics simulation, ポスター, Kazumi Saikusa, Sotaro Fuchigami, Kyohei Takahashi, Yuuki Asano, Aritaka Nagadoi, Hiroaki Tachiwana, Hitoshi Kurumizaka, Mitsunori Ikeguchi, Yoshifumi Nishimura, Satoko Akashi, 58th Annual Meeting of Biophysical Society, 2014/2/15-19, 国外.
16. 分子動力学計算を使って明らかにした F_1 -ATPase の回転機構, 口頭, 伊藤祐子, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
17. 多剤排出トランスポーター AcrB の薬剤排出メカニズムの Motion-Tree 法による解析, ポスター, 山根努, 村上聡, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
18. 粗視化 MD-SAXS 法の開発, ポスター, 小甲裕一, 荳口友隆, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
19. 蛋白質系の静電自由エネルギー計算における有限サイズ効果の補正法, ポスター, 浴本亨, 松林伸幸, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
20. MD シミュレーションによる V_1 -ATPase の回転機構の解明, ポスター, 井阪悠太, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
21. 分子動力学シミュレーションによる構造エントロピー計算法の検討, ポスター, 肥喜里志門, 吉留崇, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 14 回年会, 2014/6/25-27, 国内.
22. Development of Coarse-Grained MD-SAXS method, ポスター, Yuichi Kokabu, Tomotaka Oroguchi, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
23. Course-grained molecular dynamics simulation of V_1 -ATPase, ポスター, Hiroki Kashimura, Yuta Isaka, Yuichi Kokabu, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
24. Motion-Tree analysis of the multidrug transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Ryotaro Koike, Motonori Oota, Satoshi Murakami, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.

25. Calculation methods for configurational entropy from molecular dynamics simulations, ポスター, Simon Hikiri, Takashi Yoshidome, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
26. Finite-size effect on the charging free energy for protein system, ポスター, Toru Ekimoto, Nobuyuki Matubayasi, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
27. Molecular dynamics simulations of the β subunit in F_1 -ATPase: Relation between the large-scale structural change and common motifs, ポスター, Yuko Ito, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
28. Rotation mechanism of V_1 -ATPase studied by MD simulation, ポスター, Yuta Isaka, Takeshi Murata, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
29. Conformational sampling of HP1 chromodomain/histone H3 tail complex, 橋口惟斗, 大森聡, 森次圭, 西村善文, 木寺詔紀, 日本生物物理学会第 52 回年会, 2014/9/25-27, 国内.
30. Correction scheme of finite-size effect on the charging free energy of protein in explicit solvent, ポスター, Toru Ekimoto, Nobuyuki Matubayasi, Mitsunori Ikeguchi, 59th Annual Meeting of Biophysical Society, 2015/2/7-11, 国外.
31. Motion tree analysis of the multidrug transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Ryotaro Koike, Motonori Oota, Satoshi Murakami, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi, 59th Annual Meeting of Biophysical Society, 2015/2/7-11, 国外.
32. Development of coarse-grained MD-SAXS method and application to Swi5-Sfr1, ポスター, Yuichi Kokabu, Tomotaka Oroguchi, Mitsunori Ikeguchi, 59th Annual Meeting of Biophysical Society, 2015/2/7-11, 国外.
33. 内部座標系を用いた構造エントロピー計算, ポスター, 肥喜里志門, 吉留崇, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 15 回年会, 2015/6/24-26, 国内.
34. マルチスケール分子動力学シミュレーションによる V_1 -ATPase の回転機構の解明, ポスター, 井阪悠太, 小甲裕一, 浴本亨, 村田武士, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 15 回年会, 2015/6/24-26, 国内.
35. An accurate and efficient method to compute the hydration free energy for large and complex molecules, ポスター, Takashi Yoshidome, Toru Ekimoto, Nobuyuki Matubayasi, Yuichi Harano, Masahiro Kinoshita, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内.
36. Motion tree analysis of the multidrug transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Ryotaro Koike, Motonori Ota, Satoshi Murakami, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内.
37. Analysis for configurational entropy change calculated using internal coordinate system, ポスター, Simon Hikiri, Takashi Yoshidome, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会 2015/9/13-15, 国内.
38. Coarse-Grained MD-SAXS method and application to nucleosomes, ポスター, Yuichi Kokabu, Takashi Oda, Masaaki Sugiyama, Hitoshi Kurumizaka, Mamoru Sato, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内.

39. Rotation mechanism of V1-ATPase studied by multi-scale MD simulation, ポスター, Yuta Isaka, Yuichi Kokabu, Toru Ekimoto, Takeshi Murata, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内.
40. Conformational Dynamics of Multidrug Efflux Transporter AcrB, 口頭, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内.
41. Motion Tree delineates hierarchical structure of protein dynamics observed in molecular dynamics simulation, 森次圭, 小池亮太郎, 木寺詔紀, 日本生物物理学会第 53 回年会, 2015/9/13-15, 国内
42. An accurate and efficient, computational method for the hydration free energy of large and complex molecules, ポスター, Takashi Yoshidome, Toru Ekimoto, Nobuyuki Matubayasi, Yuichi Harano, Masahiro Kinoshita, Mitsunori Ikeguchi, 60th Annual Meeting of Biophysical Society, 2016/2/27-3/2, 国外.
43. Water pathway analysis of multi-drug efflux transporter AcrB, ポスター, Tsutomu Yamane, Ryotaro Koike, Motonori Ota, Satoshi Murakami, Akinori Kidera, Mitsunori Ikeguchi, 60th Annual Meeting of Biophysical Society, 2016/2/27-3/2, 国外.
44. 分子動力学計算と X 線小角散乱の連携によるタンパク質の動的構造解析, 口頭, 池口満徳, 日本農芸化学会 2016 年度大会, 2016/3/27-30, 国内.
45. 回転分子モーターの分子動力学シミュレーション, 口頭, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
46. 分子動力学計算 (MD) と X 線小角散乱実験 (SAXS) を組み合わせた MD-SAXS 法による 赤痢菌エフェクター蛋白質 IpaH1880 と IpaH3 の溶液構造解析, ポスター, 浴本亨, 西出旭, 桑原直之, Minsoo Kim, 加藤龍一, 水島恒裕, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
47. CS-Rosetta を用いたヒストン H2A-H2B 複合体の溶液構造解析, ポスター, 山根努, 森脇義仁, 佐藤昌彦, 大友秀明, 池口満徳, 栗田順一, 長土居有隆, 下條秀朗, 西村善文, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
48. マルチスケール解析による V1-ATPase の回転機構の解明, ポスター, 井阪悠太, 浴本亨, 小甲裕一, 村田武士, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
49. 神経軸索伸長ガイダンス分子セマフォリンと受容体プレキシンのタンパク質複合体の分子モデリング, ポスター, 下地恵令奈, 山根努, 浴本亨, 禾晃和, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
50. PDE10A 阻害剤の結合能の in silico 解析, ポスター, 湯浅千紗, 小甲裕一, 山根努, 浴本亨, 池口満徳, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
51. 糖転移酵素 POMGnT1 のステムドメインは糖鎖を認識し、O-Man 型修飾部位の制御を行う, ポスター, 桑原直之, 萬谷博, 山田健之, 舘野浩章, 弘瀬友理子, 水野真盛, 池口満徳, 平林淳, 千田俊哉, 遠藤玉夫, 加藤龍一, 日本蛋白質科学会第 16 回年会, 2016/6/7-9, 国内.
52. 多剤排出トランスポーターAcrB の分子シミュレーション, 口頭, 池口満徳, CBI 学会 2016 年大会, 2016/10-25-27, 国内.
53. 分子動力学シミュレーションと X 線溶液散乱法の連携によるタンパク質動的構造解析, 口頭, 池口満徳, 第 44 回構造活性相関シンポジウム・第 31 回農薬デザイン研究会, 2016/11/16-17, 国内.

54. Determination of the solution structure of isolated histone H2A-H2B heterodimer by using CS-Rosetta, ポスター, Tsutomu Yamane, Yoshihito Moriwaki, Hideaki Ohtomo, Mitsunori Ikeguchi, Jun-ichi Kurita, Masahiko Sato, Aritaka Nagadoi, Hideaki Shimojo, Yoshifumi Nishimura, 日本生物物理学会第 54 回年会, 2016/11/25-27, 国内.
55. Theoretical study for solute configurational entropy calculation methods, ポスター, Simon Hikiri, Takashi Yoshidome, Mitsunori Ikeguchi, 日本生物物理学会第 54 回年会, 2016/11/25-27, 国内.
56. Mechanism of the complex formation of HP1 α CD/histone H3 tail revealed by the replica-exchange molecular dynamics simulations, ポスター, 大森聡, 橋口惟斗, 森次圭, 西村善文, 木寺詔紀, 第 54 回日本生物物理学会年会, 2016/11/25, 国内
57. Apo- and antagonist-binding structures of vitamin D receptor ligand-binding domain revealed by a combination analysis of MD simulations and SAXS experiments, ポスター, Yasuaki Anami, Nobutaka Shimizu, Toru Ekimoto, Daichi Egawa, Toshimasa Itoh, Mitsunori Ikeguchi, Keiko Yamamoto, 61th Annual Meeting of Biophysical Society, 2017/2/11-15, 国外.
58. Determination of the solution structure of isolated histone H2A-H2B heterodimer by using CS-Rosetta, ポスター, Tsutomu Yamane, Yoshihito Moriwaki, Hideaki Ohtomo, Mitsunori Ikeguchi, Mitsunori Ikeguchi, Jun-ichi Kurita, Masahiko Sato, Aritaka Nagadoi, Hideaki Shimojo, Yoshifumi Nishimura, 61th Annual Meeting of Biophysical Society, 2017/2/11-15, 国外.

(3) 「国民との科学・技術対話社会」に対する取り組み

1. タンパク質のシミュレーション最前線：スパコンを使ってみよう！, 漕上壮太郎, 池口満徳, 木寺詔紀, バイオエキスパート研究体験, 2013/5/11, 国内.
2. タンパク質のシミュレーション最前線：スパコンを使ってみよう！, 漕上壮太郎, 池口満徳, 木寺詔紀, バイオエキスパート研究体験, 2014/5/10, 国内.
3. タンパク質のシミュレーション最前線：スパコンを使ってみよう！, 漕上壮太郎, 池口満徳, 木寺詔紀, バイオエキスパート研究体験, 2015/5/30, 国内.
4. タンパク質のシミュレーション最前線：スパコンを使ってみよう！, 漕上壮太郎, 池口満徳, 木寺詔紀, バイオエキスパート研究体験, 2016/5/28, 国内.
5. スーパーコンピュータで探る生命分子の働きと薬づくり, 池口満徳, 理化学研究所横浜キャンパス・横浜市立大学鶴見キャンパス一般公開講演会, 2016/9/10, 国内.

(4) 特許出願

該当なし。