

新学術領域研究「化学コミュニケーションのフロンティア (FY2017-2021)」
 成果発表リスト A03 (公募研究, Recruited Groups) FY2018~2019

1. 小和田俊行 (東北大学多元物質科学研究所・助教)

KOWADA, Toshiyuki (Assistant Professor, Tohoku University)

【原著論文, original journal】

- 1) Mashita, T., Kowada, T., Takahashi, H., Matsui, T., *Mizukami, S. Light-wavelength-based Quantitative Control of Dihydrofolate Reductase Activity Using Photochromic Isostere of Inhibitor. *ChemBioChem* 2019. doi: 10.1002/cbic.201800816.

【解説・総説, review】

【著書】

- 1) 小和田俊行, 水上進. 実験医学増刊「生きてるものは全部観る！イメージングの選び方・使い方100+」(原田慶恵, 永井健治／編. 該当範囲:第9章「57. タンパク質ラベル化技術—HaloTag, SNAP-tag, tetracycline tag」), pp147-149, 2018.

【招待講演・基調講演】

国際：

- 1) Kowada, T. Design and synthesis of functional small-molecule probes for fluorescence imaging. The 6th International Symposium on Bioimaging. Tokyo, Sep. 2019. (招待講演)

国内：

- 1) 小和田俊行. 細胞内オルガネラにおける遊離亜鉛濃度解析を目指した小分子蛍光プローブの開発. 新学術領域研究「化学コミュニケーションのフロンティア」第4回若手シンポジウム, 横浜, 12月, 2019. (招待講演)
- 2) 小和田俊行. 細胞機能を解き明かす機能性小分子蛍光プローブの合成. 第8回化学フロンティア研究会, 神戸, 8月, 2019. (招待講演)
- 3) 小和田俊行. 「生体機能解析に供する機能性小分子の開発と蛍光イメージング」. 平成30年度東日本分析化学若手交流会. 宮城, 7月, 2018.

【特許等の出願状況】

- 1) 水上進, 間下貴斗, 小和田俊行, 松井敏高. 光応答性化合物. 東北大学. 特願 2018-165991 (出願日, 2018年9月5日). 国内.

【報道記事】

【受賞・表彰】

- 1) 令和元年度 (第32回) 有機合成化学協会研究企画賞, フッ素原子の特異な性質を利用した長波長蛍光色素群の網羅的合成と生命科学研究への応用, 有機合成化学協会, 2019年12月2日
- 2) 日本バイオイメーjing学会 奨励賞, Design and synthesis of functional small-molecule probes for fluorescence imaging, 日本バイオイメーjing学会, 2019年9月23日

【アウトリーチ活動】

2. 金子周司 (京都大学大学院薬学研究科・教授)

KANEKO, Shuji (Professor, Kyoto University)

【原著論文, original journal】

- 1) Wada, S., Yanagida, J., Sasase, H., Zhang, T., Li, X., Kamii, H., Domoto, M., Deyama, S., Hinoi, E., Yamanaka, A., Nishitani, N., Nagayasu, K., Kaneko, S., Minami, M., *Kaneda, K. Acute restraint stress augments the rewarding memory of cocaine through activation of $\alpha 1$ adrenoceptors in the medial prefrontal cortex of mice. *Neuropharmacology*. 166, 107968, 2020.
- 2) Zhang, T., Yanagida, J., Kamii, H., Wada, S., Domoto, M., Sasase, H., Deyama, S., Takarada, T., Hinoi, E., Sakimura, K., Yamanaka, A., Maejima, T., Mieda, M., Sakurai, T., Nishitani, N., Nagayasu, K., Kaneko, S., Minami, M., *Kaneda, K. Glutamatergic neurons in the medial prefrontal cortex mediate the formation and retrieval of cocaine-associated memories in mice. *Addict. Biol.* 25, e12723, 2020.
- 3) Nagai, Y., Nishitani, N., Yasuda, M., Ueda, Y., Fukui, Y., Andoh, C., Shirakawa, H., Nakagawa, T., Inoue, KI., *Nagayasu, K., Kasparov, S., Nakamura, K., *Kaneko, S. Identification of neuron-type specific promoters in monkey genome and their functional validation in mice. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 518, 619-624, 2019.
- 4) Nishitani, N., *Ohmura, Y., Nagayasu, K., Shibui, N., Kaneko, S., Ohashi, A., Yoshida, T., Yamanaka, A., Yoshioka, M. CRISPR/Cas9-mediated in vivo gene editing reveals that neuronal 5-HT1A receptors in the dorsal raphe nucleus contribute to body temperature regulation in mice. *Brain. Res.* 1719, 243-252, 2019.
- 5) Kakae, M., Tabori, S., Morishima, M., Nagayasu, K., *Shirakawa, H., Kaneko, S. Depletion of microglia ameliorates white matter injury and cognitive impairment in a mouse chronic cerebral hypoperfusion model. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 514, 1040-1044, 2019.
- 6) Ito, S., Deyama, S., Domoto, M., Zhang, T., Sasase, H., Fukao, A., Esaki, H., Hinoi, E., Kaneko, S., *Kaneda, K. Effects of the synthetic cannabinoid 5F-AMB on anxiety and recognition memory in mice. *Psychopharmacology*. 236, 2235-2242, 2019.
- 7) Kakae, M., Miyanohara, J., Morishima, M., Nagayasu, K., Mori, Y., *Shirakawa, H., Kaneko, S. Pathophysiological role of TRPM2 in age-related cognitive impairment in mice. *Neuroscience*. 408, 204-213, 2019.
- 8) Nishitani, N., *Nagayasu, K., Asaoka, N., Yamashiro, M., Andoh, C., Nagai, Y., Kinoshita, H., Kawai, H., Shibui, N., Liu, B., Hewinson, J., Shirakawa, H., Nakagawa, T., Hashimoto, H., *Kasparov, S., *Kaneko, S. Manipulation of dorsal raphe serotonergic neurons modulates active coping to inescapable stress and anxiety-related behaviors in mice and rats. *Neuropsychopharmacology*. 44, 721-732, 2019.
- 9) Asaoka, N., Nishitani, N., Kinoshita, H., Nagai, Y., Hatakama, H., *Nagayasu, K., Shirakawa, H., Nakagawa, T., *Kaneko, S. An Adenosine A2A Receptor Antagonist Improves Multiple Symptoms of Repeated Quinpirole-Induced Psychosis. *eNeuro*. 6, pii: ENEURO.0366-18.2019. 2019.
- 10) Andoh, C., Nishitani, N., Hashimoto, E., Nagai, Y., Takao, K., Miyakawa, T., Nakagawa, T., Mori, Y., Nagayasu, K., *Shirakawa, H., Kaneko, S. TRPM2 confers susceptibility to social stress but is essential for behavioral flexibility. *Brain Res.* 1704, 68-77, 2018.
- 11) Tsutsui, M., Hirase, R., Miyamura, S., Nagayasu, K., Nakagawa, T., Mori, Y., *Shirakawa, H., Kaneko, S. TRPM2 Exacerbates Central Nervous System Inflammation in Experimental Autoimmune Encephalomyelitis by Increasing Production of CXCL2 Chemokines. *J Neurosci*. 38, 8484-8495, 2018.
- 12) Hiyama, H., Yano, Y., So, K., Imai, S., Nagayasu, K., Shirakawa, H., *Nakagawa, T., Kaneko, S. TRPA1 sensitization during diabetic vascular impairment contributes to cold hypersensitivity in a mouse model of painful diabetic peripheral neuropathy. *Mol Pain*. 14, 1744806918789812, 2018.
- 13) Miyanohara, J., Kakae, M., Nagayasu, K., Nakagawa, T., Mori, Y., Arai, K., *Shirakawa, H., Kaneko, S. TRPM2 Channel Aggravates CNS Inflammation and Cognitive Impairment via Activation of Microglia in Chronic Cerebral Hypoperfusion. *J Neurosci*. 38, 3520-3533, 2018.

【解説・総説, review】

- 1) *Kaneko, S., Nagashima, T. Drug Repositioning and Target Finding Based on Clinical Evidence. *Biol. Pharm. Bull.* 43, 362-365, 2020.

【著書】

【招待講演・基調講演】

国際：

- 1) Kaneko, S. Exploration of the Molecular Mechanism of Side Effects. Systems Pharmacology and Artificial Intelligence (AI) based on Real World "Big" Data, Kyoto, Japan, July, 2018.
- 2) Kaneko, S. Role of TRPA1 in ischemia/reperfusion-induced painful dysesthesia and oxaliplatin-induced cold hypersensitivity. 18th World Congress of Basic and Clinical Pharmacology, Kyoto, Japan, July, 2018.

国内：

- 1) 金子周司. 臨床エビデンスに基づくドラッグリポジショニングと創薬標的の発見. 日本薬物動態学会第 34 回年会, つくば市, 12 月, 2019. (招待講演)
- 2) 金子周司. データ駆動型研究で生まれる仮説と予測が変える薬理学. 第 93 回日本薬理学会年会, 横浜, 3 月, 2020. (招待講演) (誌上開催)
- 3) 金子周司, 長島卓也, 戸田千尋, 酒井幸, 永安一樹. 医療ビッグデータを薬物治療と創薬に活かす-序論: どんなデータがあつて何にどう有用なのか? 日本薬学会第 140 年会, 京都, 3 月, 2020. (招待講演) (誌上開催)
- 4) 金子周司. 臨床エビデンスに基づくドラッグ・リポジショニングと創薬標的の発見. 第 92 回日本薬理学会年会. 大阪, 3 月, 2019.

【特許等の出願状況】

- 1) 特願 2019-122840 遅発性ジスキネジアの治療又は予防組成物、及び遅発性ジスキネジアを治療又は予防するための有効成分のスクリーニング方法、令和元年 7 月 1 日

【報道記事】

【受賞・表彰】

【アウトリーチ活動】

3. 岩田浩明 (京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻・特定助教)

IWATA, Hiroaki (Assistant Professor, Kyoto University)

【原著論文, original journal】

- 1) Iwata, H., Kojima, R., *Okuno, Y. An in silico approach for integrating phenotypic and target-based approaches in drug discovery. *Molecular Informatics*, 39. 1-2, 2020.

【解説・総説, review】

【著書】

【招待講演・基調講演】

国内：

- 1) 岩田浩明. Application of artificial intelligence for drug repositioning. 第 93 回薬理学会, 神奈川, 2020.
(招待講演) (誌上開催)
- 2) 岩田浩明. 医薬品開発プロセスにおける AI 応用. 興和株式会社富士研究所, 静岡, 2019(招待講演)

【特許等の出願状況】

【報道記事】

【受賞・表彰】

【アウトリーチ活動】

4. 諸橋賢吾 (東京理科大学工学部応用生物科学科・准教授)

MOROHASHI, Kengo (Associate Professor, Tokyo University of Science)

【原著論文, original journal】

- 1) Arai, H., Yanagiura, K., Toyama, Y., *Morohashi, K., Genome-wide analysis of MpBHLH12, a IIIIf basic helix-loop-helix transcription factor of *Marchantia polymorpha*. *J. Plant Res.* 132, 197-209, 2019.

【解説・総説, review】

- 1) *Morohashi, K., Russinova, E. Towards a next step of the research of regulatory networks in plant growth and development. *J. Plant Res.* 132, 155-157, 2019.

【著書】

【招待講演・基調講演】

【特許等の出願状況】

【報道記事】

【受賞・表彰】

【アウトリーチ活動】

- 1) 親子科学実験教室 (千葉, 2018 年 7 月 27 日~29 日) において、小学生および保護者 (約 50 名) に対して「DNA を見てみよう (ブロッコリーから DNA を抽出する実験)」を行い関連領域の紹介を行った。

5. 清宮啓之 (公益財団法人がん研究会がん化学療法センター分子生物治療研究部・部長)

SEIMIYA, Hiroyuki (Chief, The Cancer Institute of JFCR)

【原著論文, original journal】

- 1) Kawakami, R., Mashima, T., Kawata, N., Kumagai, K., Migita, T., Sano, T., Mizunuma, N., Yamaguchi, K., *Seimiya, H. ALDH1A3-mTOR axis as a therapeutic target for anticancer drug-tolerant persister cells in gastric cancer. *Cancer Sci.* 111, 962-973, 2020.
- 2) Jang, M.K., Mashima, T., *Seimiya, H. Tankyrase inhibitors target colorectal cancer stem cells via AXIN-dependent downregulation of c-KIT tyrosine kinase. *Mol. Cancer Ther.* 19, 765-776, 2020.
- 3) Matsusaka, S., Hanna, D.L., Ning, Y., Yang, D., Cao, S., Berger, M.D., Miyamoto, Y., Suenaga, M., Dan, S., Mashima, T., Seimiya, H., Zhang, W., *Lenz, H.J. Epidermal growth factor receptor mRNA expression: A potential molecular escape mechanism from regorafenib. *Cancer Sci.* 111, 441-450, 2020.
- 4) Mizutani, A., *Seimiya, H. Tankyrase promotes primary precursor miRNA processing to precursor miRNA. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 522, 945-951, 2020.
- 5) *Suenaga, M., Wakatsuki, T., Mashima, T., Ogura, M., Ichimura, T., Shinozaki, E., Nakayama, I., Osumi, H., Ota, Y., Takahari, D., Chin, K., Seimiya, H., Yamaguchi, K. A phase I study to determine the maximum tolerated dose of trifluridine/tipiracil and oxaliplatin in patients with refractory metastatic colorectal cancer: LUPIN study. *Invest. New Drugs.* 38, 111-119, 2020.
- 6) *Mashima, T., Iwasaki, R., Kawata, N., Kawakami, R., Kumagai, K., Migita, T., Sano, T., Yamaguchi, K., *Seimiya, H. *In silico* chemical screening identifies epidermal growth factor receptor as a therapeutic target of drug-tolerant CD44v9-positive gastric cancer cells. *Br J Cancer.* 121, 846-856, 2019.
- 7) *Shirai, F., Tsumura, T., Yashiroda, Y., Yuki, H., Niwa, H., Sato, S., Chikada, T., Koda, Y., Washizuka, K., Yoshimoto, N., Abe, M., Onuki, T., Mazaki, Y., Hirama, C., Fukami, T., Watanabe, H., Honma, T., Umehara, T., Shirouzu, M., Okue, M., Kano, Y., Watanabe, T., Kitamura, K., Shitara, E., Muramatsu, Y., Yoshida, H., Mizutani, A., Seimiya, H., Yoshida, M., *Koyama, H. Discovery of novel spiroindoline derivatives as selective tankyrase inhibitors. *J Med Chem.* 62, 3407-3427, 2019.
- 8) Okamoto, K., *Seimiya, H. Revisiting telomere shortening in cancer. *Cells* 8, 107, 2019.
- 9) Okamoto, K., Ohishi, T., Kuroiwa, M., Iemura, S. I., Natsume, T., *Seimiya, H. MERIT40-dependent recruitment of tankyrase to damaged DNA and its implication for cell sensitivity to DNA-damaging anticancer drugs. *Oncotarget* 9, 35844-35855, 2018.
- 10) Mizutani, A., Yashiroda, Y., Muramatsu, Y., Yoshida, H., Chikada, T., Tsumura, T., Okue, M., Shirai, F., Fukami, T., Yoshida, M., *Seimiya, H. RK-287107, a potent and specific tankyrase inhibitor, blocks colorectal cancer cell growth in a preclinical model. *Cancer Sci.* 109, 4003-4014, 2018.
- 11) Ma, Y., Tsushima, Y., Sakuma, M., Sasaki, S., Iida, K., Okabe, S., Seimiya, H., Hirokawa, T., *Nagasawa, K. Development of G-quadruplex ligands for selective induction of a parallel-type topology. *Organic Biomol. Chem.* 16, 7375-7382, 2018.
- 12) Hatta, T., Iemura, S.I., Ohishi, T., Nakayama, H., Seimiya, H., Yasuda, T., Iizuka, K., Fukuda, M., Takeda, J., *Natsume, T., *Horikawa, Y. Calpain-10 regulates actin dynamics by proteolysis of microtubule-associated protein 1B. *Sci. Rep.* 8, 16756, 2018.
- 13) Fujiwara, C., Muramatsu, Y., Nishii, M., Tokunaka, K., Tahara, H., Ueno, M., Yamori, T., Sugimoto, Y., *Seimiya, H. Cell-based chemical fingerprinting identifies telomeres and lamin A as modifiers of DNA damage response in cancer cells. *Sci. Rep.* 8, 14827, 2018.

【解説・総説, review】

- 1) *清宮啓之. テロメア制御因子を標的とした革新的がん治療薬の開発. 医学のあゆみ「がん研究 10 年戦略の成果と課題 —基礎から実用化までをつなぐ研究開発」, 271, 781-787, 2019.
- 2) Okamoto, K., *Seimiya, H. From the wings to the center stage of chromosomes. *J. Biol. Chem.* 294, 17723-17724, 2019.
- 3) *Sueoka, E., Watanabe, T., Mashima, T., Shirakami, Y., Komori, A., Matsuo, K., Yoshikawa, H.Y., Cho, K.A.,

Park, T.J., Seimiya, H., Kim, E.G., Suganuma, M., Chung, J. Meeting report of the 14th Japan-Korea joint symposium on cancer and aging research: current status of translational research and approaches to precision medicine. *J. Cancer Res. Clin. Oncol.* 145, 1263-1271, 2019.

【著書】

- 1) *清宮啓之 (編). 進化するがん創薬 がん科学と薬物療法の最前線, 化学同人, 単行本 (総ページ数 324), 2019.
- 2) *新家一男, 清宮啓之. テロメラーゼ関連薬剤. 決定版 阻害剤・活性化剤ハンドブック, 秋山徹, 河府和義 (編), 羊土社, pp.536-553, 2019.

【招待講演・基調講演】

国際:

- 1) Seimiya, H. Telomere as the starting point of anticancer drug discovery. LyonSE&N-ELyT Workshop 2020. Lyon, France, Feb. 2020 (招待講演)
- 2) Seimiya, H. Telomere as the starting point of anticancer drug discovery. The 7th Symposium, RIKEN-Max Planck Joint Research Center. Munich, Germany, Sep. 2019. (招待講演)
- 3) Seimiya, H. Telomere as the starting point of anticancer drug discovery. 11th AACR-JCA Joint Conference on Breakthroughs in Cancer Research: Biology, to Precision Medicine, Hawaii, USA, February, 2019.

国内:

- 1) 清宮啓之. 染色体の末端から始まるがん創薬. JSPS「日本におけるケミカルバイオロジーの新展開」に関する産学協力研究委員会, 東京, 12月, 2019. (招待講演)
- 2) 清宮啓之. ケミカルツールを利用した四重鎖核酸の統合機能解析とその応用. 化学コミュニケーションのフロンティア第6回公開シンポジウム, 横浜, 12月, 2019. (招待講演)
- 3) 清宮啓之. がんにおけるテロメア短縮のパラドクスを再考する. 第42回分子生物学会年会ワークショップ, 福岡, 12月, 2019. (招待講演)
- 4) Seimiya H. Crossroads of telomere biology and cancer drug discovery. 第78回日本癌学会学術総会コアシンポジウム, 京都, 9月, 2019. (招待講演)
- 5) 清宮啓之. 四重鎖核酸ケモプローブに対する細胞応答の解明とがん創薬への応用. 第92回日本生化学会大会シンポジウム, 横浜, 9月, 2019. (招待講演)
- 6) Seimiya H. Tankyrase and G-quadruplex as molecular targets for cancer therapy. 第25回日本遺伝子細胞治療学会シンポジウム, 東京, 7月, 2019. (招待講演)
- 7) 清宮啓之. 染色体の末端から始まるがん創薬. 徳島大学大学院医歯薬学研究部呼吸器・膠原病内科学分野開講48周年記念会, 徳島, 5月, 2019. (基調講演)
- 8) Seimiya, H. G-quadruplex nucleic acids as a molecular target for cancer therapy. 第77回日本癌学会学術総会, 大阪, 9月, 2018.
- 9) Seimiya, H. G-quadruplex as a molecular target for cancer therapy. 第41回日本分子生物学会年会, 横浜, 11月, 2018.
- 10) 清宮啓之, 新家一男, 長澤和夫. 「グアニン4重鎖安定化物質の分子プロファイリングとがん創薬への展開」日本農芸化学会2019年度大会, 東京, 3月, 2019.

【特許等の出願状況】

- 1) 長澤和夫, 松田未沙子, 馬悦, 清宮啓之. がんを治療するための組み合わせ物及び医薬組成物. 国立大学法人東京農工大学, 公益財団法人がん研究会. 特願 2020-008592 (2020年1月22日). 国内.
- 2) 長澤和夫, 松田未沙子, 馬悦, 清宮啓之. 抗がん剤. 国立大学法人東京農工大学, 公益財団法人がん研究会. PCT/JP2019/028398 (2019年7月19日). PCT.

- 3) 長澤和夫, 松田未沙子, 馬悦, 清宮啓之. 抗腫がん剤. 東京農工大学, がん研究会. 特願 2018-136579 (2018/7/20) . 国内.

【報道記事】

【受賞・表彰】

- 1) がん研究会学術賞、哺乳類における染色体テロメア伸長の分子メカニズム解明とその関連分子を標的とした分子創薬、公益財団法人がん研究会、2019年1月4日

【アウトリーチ活動】

- 1) がん研究会がん化学療法センター分子生物治療研究部の職場訪問会（東京, 2019年12月26日）において、中学生（14名）に対して「ケミカルツールを基盤としたがん創薬」の研究紹介を行うとともに、細胞培養・顕微鏡観察・基本実験操作などの体験学習および対話学習を行った。
- 2) がん研究会がん化学療法センター分子生物治療研究部の職場訪問会（東京, 2019年7月25日）において、中学生（15名）に対して「ケミカルツールを基盤としたがん創薬」の研究紹介を行うとともに、細胞培養・顕微鏡観察・基本実験操作などの体験学習および対話学習を行った。
- 3) がん研究会がん化学療法センター分子生物治療研究部の職場訪問会（東京, 2018年7月25日）において、中学生（15名）に対して「ケミカルツールを基盤としたがん創薬」の研究紹介を行うとともに、細胞培養・顕微鏡観察・基本実験操作などの体験学習および対話学習を行った。

6. 齋藤大明（理化学研究所生命機能科学研究センター・研究員）

SAITO, Hiroaki (Research Scientist, RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research)

【原著論文, original journal】

- 1) *Saito, H., Morishita, T., Mizukami, T., Nishiyama, K., Kawaguchi, K., Nagao, H. Free energy profiles of lipid translocation across pure POPC and POPC/CHOL bilayer: all-atom molecular dynamics study. *J. Phys.: Conf. Ser.* 1290 012020, 2019.
- 2) *Otsuka, T., Okimoto, N., Saito, H., Taiji, M. Quantum chemical analysis of reaction indices and reaction path for drug molecules. *J. Phys.: Conf. Ser.* 1290 012021, 2019.
- 3) Nakao, H., Sugimoto, Y., Ikeda, K., Saito, H., *Nakano, M. Structural Feature of Lipid Scrambling Model Transmembrane Peptides: Same-Side Positioning of Hydrophilic Residues and Their Deeper Position. *J. Phys. Chem. Lett.* 11, 1662–1667, 2020.
- 4) *Saito, H., Morishita, T., Mizukami, T., Nishiyama, K., Kawaguchi, K., Nagao, H. Molecular dynamics study of binary POPC bilayers: molecular condensing effects on membrane structure and dynamics. *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*, 1136, 012022, 1-9, 2018.
- 5) Aoyama, S., Kaiwa, J., Chantngarm, P., Tanibayashi, S., Saito, H., Hasegawa, M., *Nishidate, K. Oxygen reduction reaction of FeN₄ center embedded in graphene and carbon nanotube: Density functional calculations. *AIP Advances*, 8, 115113, 1-9, 2018.
- 6) Takaoka, Y., Iwahashi, M., Chini, A., Saito, H., Ishimaru, Y., Egoshi, S., Kato, N., Tanaka, M., Bashir, K., Seki, M., Solano, R., *Ueda M., A rationally designed JAZ subtype-selective agonist of jasmonate perception. *NATURE COMMUNICATIONS*, 9:3654, 2019.
- 7) Nakao, H., Hayash, C., Ikeda, K., Saito, H., Nagao, H., *Nakano, M. Effects of Hydrophilic Residues and Hydrophobic Length on Flip-Flop Promotion by Transmembrane Peptides. *J. Phys. Chem. B*, 122, 313-319, 2019.
- 8) Nakamura, S., Suzuki, S., Saito, H., *Nishiyama, K. Cholesterol blocks spontaneous insertion of membrane proteins into liposomes of phosphatidylcholine. *The Journal of Biochemistry*, 163, 313–319, 2019.

【解説・総説, review】

- 1) *上田 実, 高岡 洋輔, 齋藤 大明. 有機化学者が計算化学者に助けられてリガンド-受容体間ドッキングシミュレーションによる分子設計に成功するまで, 分子シミュレーション学会誌 "アンサンブル" 21(3) 196-203, 2019.
- 2) *藤崎弘士, 齋藤大明. 特集「機械学習と分子シミュレーション」にあたって. *分子シミュレーション学会誌アンサンブル*, 21, 1, 6-7, 2019.
- 3) *齋藤大明*, 藤崎弘士. 特集「機械学習と分子シミュレーション」にあたってII. *分子シミュレーション学会誌アンサンブル*, 21, 2, 89-90, 2019.

【著書】

【招待講演・基調講演】

国内:

- 1) 齋藤大明. 深層学習と分子シミュレーションを用いた計算分子設計. 新学術領域研究「化学コミュニケーションのフロンティア」第3回公開シンポジウム. 東京, 6月, 2018.

【特許等の出願状況】

【報道記事】

- 1) 「植物の病原菌感染を防ぐ画期的な植物免疫強化剤を開発し植物免疫の歴史的難問「生長と防御のトレードオフ」を解決」、東北大学・理研、プレスリリース、2018. 9. 18.
URL: <https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2018/09/press-20180918-ueda.html> (東北大学)
URL: http://www.riken.jp/pr/press/2018/20180918_1/ (理研)

【受賞・表彰】

【アウトリーチ活動】

- 1) 理化学研究所の一般公開イベント（大阪、2018年10月27日）にて一般公開参加者（約600名）に対してコンピュータを用いた創薬研究の紹介を行った。
- 2) サイエンスカフェイベント（第23回 理カフェ、大阪、2018年4月21日）にて、一般参加者（約40名）に対して「コンピュータシミュレーションで見る生体分子の世界ーコンピュータ創薬への挑戦ー」の公演を行った。