

## 開催のご案内

下記の通り、令和5年度 新学術領域研究「高速分子動画」シンポジウムを開催致します。

名称	高速分子動画 国際シンポジウム 2023
開催日程	2023年11月30日(木)～12月1日(金)
会場	淡路夢舞台国際会議場+オンライン(ハイブリッド開催) 〒656-2306 兵庫県淡路市夢舞台1番地 HP: <a href="http://www.yumebutai.co.jp/">http://www.yumebutai.co.jp/</a> シンポジウム、領域会議: イベントホール ショートトークセッション: イベントホール, 403, 404, 405 ポスターセッション: イベントホールホワイエ・地下1階ロビー
アクセス	<a href="https://www.yumebutai.co.jp/access/">https://www.yumebutai.co.jp/access/</a> <a href="https://awaji.grandnikko.com/guide/access.php">https://awaji.grandnikko.com/guide/access.php</a>
プログラム	11月30日 13:10-19:00 国際シンポジウム 19:30-21:00 (夕食) 21:00-22:30 ポスターセッション 12月1日 9:00-10:40 ショートトークセッション 11:15-12:00 新学術領域「高速分子動画」領域会議 ※国際シンポジウム・ショートトークセッションは配信有。領域会議は関係者のみ配信有。
講演時間	国際シンポジウム: 発表25分, 質疑応答8分 ショートトークセッション: 発表5分, 質疑応答4分 領域会議: 発表6分
趣旨	新学術領域「高速分子動画」の領域会議を兼ねたシンポジウムです。X線自由電子レーザーを用いて、タンパク質の動きを原子分解能でかつ実際のタイムスケールでみるだけでなく、その結果を用いて新しい生体高分子の制御法を開発しています。実際に観察された「高速分子動画」を計算科学や分光学の手法を用いて定量的、理論的に解釈し、新しい機能性タンパク質や生体高分子を制御できる新規化合物などを創生することにより、イメージング、光遺伝学、薬理学といった幅広い分野に貢献したいと考えています。膜タンパク質や酵素を含む幅広い生体高分子への適用を目指しています。
主催プロジェクト	令和元年度採択 科学研究費助成事業・新学術領域研究(研究領域提案型)「高速分子動画法によるタンパク質非平衡状態構造解析と分子制御への応用」
お問い合わせ先	新学術領域「高速分子動画」事務局 <a href="mailto:mol_movie@mfour.med.kyoto-u.ac.jp">mol_movie@mfour.med.kyoto-u.ac.jp</a> (担当:吉田)

※国際シンポジウム・ショートトークセッションはオープンセッションです。会場/オンライン共に参加制限はありません。

※領域会議はクローズドセッションです。会場/オンライン共に、代表者・分担者・総括班評価者・学術調査官の参加で実施します。研究協力者(HPにお名前のない方)は、代表に相談のうえ、総括班で承認しますので申請してください。

※オンライン開催詳細(Zoom ID等)については、別途ご案内します。

## Oral Session Program

Thu. 30th November				
	Speaker	Affiliation	Title	Chair
12:00-13:00	Set up posters			
13:10-13:20	So Iwata	Kyoto University	Opening Remarks	
13:20-13:55	Shigeki Kiyonaka	Nagoya University	Molecular-targeted chemogenetics, a next-generation technique for manipulating cell-surface receptors	Nagasawa
13:55-14:30	Yoshitaka Bessho	RIKEN SPring-8 Center/ University of Tokyo	Time-resolved crystallography of ultrafast light-driven DNA repair by photolyases	Park
14:30-15:05	Jiangyun Wang	Chinese Academy of Sciences	Molecule movies enabled by genetic code expansion (Online)	Kiyonaka
Break (15:05-15:15)				
15:15-15:50	Osamu Miyashita	RIKEN R-CCS	Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology	Shinoda
15:50-16:25	Ana-Nicoleta Bondar	University of Bucharest	Water-mediated hydrogen-bond networks for signal relay in G Protein Coupled Receptors (Online)	Miyashita
16:25-17:00	Gerhard Hummer	Max Planck Institute of Biophysics	Molecular simulations in the era of AI and exascale computing (Online)	Shoji
Break (17:00-17:10)				
17:10-17:45	Takeshi Murakawa	Osaka Medical and Pharmaceutical University	Molecular movie of the catalytic reaction of bacterial copper amine oxidase conducted by mix-and-inject serial femtosecond X-ray crystallography	Kimura
17:45-18:20	Valérie Panneels	Paul Scherrer Institut	Ultrafast structural changes direct the first molecular events of vision (Online)	Nango
18:20-18:55	Christopher Schofield	University of Oxford	Time-resolved studies on the mechanisms of oxygenases and related enzymes (Online)	Nagano
18:55-19:00	So Iwata	Kyoto University	Closing Remarks	
Dinner (19:30-21:00)				
21:00-22:30	Poster Session			
22:30-	Remove posters			

### Short-Talk Session Program

Fri. 1 <sup>st</sup> December				
Room	Event hall	403	404	405
	A01_Structural biology	A01_Structural biology	B01_Molecular Movie Platform Design&C01_Spectroscopy	C01_Computational Chemistry
Chair	Iwata	Park	Yamamoto / Kubo	Miyashita
9:00-9:10	Masahiro Fukuda	Michihiro Suga	Hiroaki Matsuura	Kiyoshi Yagi
9:10-9:20	Toshiaki Hosaka	Atsuhiko Shimada	Akihiro Suzuki	Mitsuo Shoji
9:20-9:30	Ritsu Mizudori	Junpei Yamamoto	Tetsunari Kimura	Duy Phuoc Tran
9:30-9:40	Kota Katayama	Yasufumi Umena	Yosuke Mizuno	Akio Kitao
9:40-9:50	-	Sam-Yong Park	Yuji Furutani	Ayori Mitsutake
9:50-10:00	-	-	Tetsuro Katayama (Online)	-
	A01_Chemical biology	A01_Structural biology	/	C01_Computational Chemistry
Chair	Kiyonaka	Nagano		Shoji
10:00-10:10	Takuya Terai	Toru Nakatsu		Shigehiko Hayashi (Online)
10:10-10:20	Takushi Shimomura	Takehiko Tosha		Junichi Ono
10:20-10:30	Tomohiro Doura	Eiichi Mizohata		Sriram Srinivasa Raghavan
10:30-10:40	Tsuyoshi Araya	Shingo Nagano		Keiko Shinoda
Coffee Break & Photo Shoot (10:40-11:15)				

### 新学術領域「高速分子動画」領域会議プログラム (Closed)

12月1日(金)			
	講演者	所属	タイトル
11:15-11:21	岩田 想	京都大	はじめに／構造生物の結果
11:21-11:27	清中 茂樹	名古屋大	高速分子動画撮像に向けたケミカル光制御技術の開発
11:27-11:33	南後 恵理子	東北大	時分割実験のための多様な反応誘起システムの開発
11:33-11:39	久保 稔	兵庫県立大	時間分解分光で観るタンパク質の反応ダイナミクス
11:39-11:45	宮下 治	理化学研究所	分子シミュレーションによるタンパク質化学反応ダイナミクスの解明
11:45-12:00	質疑応答・アドバイザーコメント		

## Poster Session Program

Thu. 30th November

	名前	所属	ポスタータイトル
1	荒谷 剛史	京都大学医学研究科	Crystal structure of photoresponsive ligand bound adenosine A2A receptor
2	安東 智大	京都大学理学研究科	イクオリンの生物発光過程についての理論的研究
3	伊藤 朱音	京都大学医学研究科	アンタゴニスト結合型ヒスタミンH4受容体の立体構造解析
4	井上 始	名古屋大学工学研究科	化学遺伝学的手法を用いたセロトニン5-HT2A受容体に対するAntagonistの親和性制御
5	梅名 泰史	名古屋大学シンクロトン光研究センター	Fast time-resolved structural analysis of light-response in photosynthetic antenna protein Phycocyanin
6	江尻 智森	京都大学理学研究科化学専攻	アニオンポンプロドプシン NpHR のスイッチング機構解明に向けた理論的研究
7	戎 唯良汰	東京大学理学系研究科	Cryo-EM structure analysis of Schizorhodopsins from mesophilic archaea
8	王 雨竹	東京大学大学院理学系研究科	藍色光を受容するチャネルロドプシンの構造及び機能解析
9	小野 純一	Waseda University	Hybrid in silico drug study based on quantum molecular dynamics with virtual screening and docking
10	片山 耕大	名工大院工	Identifying functional hotspot residues for activation in M2 muscarinic receptor (M2R)
11	北尾 彰朗	東京工業大学生命理工学院	Molecular mechanisms of structure support and smooth rotation in the bushing/rod complex of bacterial flagella
12	木村 哲就	神戸大学大学院理学研究科	Stepwise calcium binding in photoluminescence protein; aequorin, revealed by the time-resolved spectroscopy
13	近藤 匠	名古屋大学工学研究科	作用薬の機能転換を利用した代謝型グルタミン酸受容体1の活性制御
14	志甫谷 涉	東京大学理学系研究科	Cryo-EM structure of the zeaxanthin-xanthorhodopsin complex
15	島田 敦広	岐阜大学応用生物科学部	XESとXRDの同時測定法を用いた、シトクロム酸化酵素の反応機構解明の試み
16	下村 拓史	生理学研究所 神経機能素子研究部門	Characterization of a light-gated K <sup>+</sup> channel generated by introducing an photo-isomerizing unnatural amino acid
17	庄司 光男	筑波大CCS	Overview of our research collaborations performed in the research area of "molecular movies"
18	Duy Phuoc Tran	東京工業大学・生命理工学院	How the mGlu1 receptor dimer be activated: a molecular dynamics study
19	菅 倫寛	岡山大学異分野基礎科学研究所	Real-Time Structural Changes during the Light-induced Water Oxidation of Photosystem II Caught by Time-Resolved Crystallography
20	鈴木 啓文	名古屋大学工学研究科	光薬理学によるアデノシンA2A受容体のサブタイプ選択的な活性化
21	Sriram Srinivasa Raghavan	RIKEN	ResiDEM: Analytical Tool for Isomorphous Difference Electron Density Maps Utilizing Dynamic Residue Identification via Density Clustering.
22	鈴木 明大	北海道大学電子科学研究所	Low background graphene sample holder for XFEL-based crystallography and imaging
23	田口 真彦	東北大学多元物質科学研究所	Understanding of protein functional expression using hybrid QM/MM free energy method

名前	所属	ポスタータイトル
24 田中 達基	東京大学理学系研究科	Structural basis for the highly sensitive channelrhodopsin GtCCR4
25 永澤 秀子	岐阜薬科大学	生理活性作用を有するデカリン生成のための化学的および酵素的分子内Diels-Alder環化付加反応の立体制御機構の解明
26 Nipawan Nuemket	JASRI	Towards Elucidating the Structural Dynamics of Animal and Microbial Rhodopsin using Time-Resolved Crystallography at XFEL and Synchrotron
27 Basudev Maity	Tokyo Institute of Technology	Observation of a CO release reaction within protein crystal.
28 長谷川 和也	JASRI	SPring-8 BL41XUIにおける時分割構造解析環境の構築
29 馬場 清喜	高輝度光科学研究センター	Non-cryogenic X-ray crystallography under various ambient conditions using the humid air and glue-coating (HAG) method
30 原 隆史	名古屋大学工学研究科	ループ工学に基づいたドーパミン受容体の活性制御
31 日野 智也	鳥取大学工学研究科	プレートスキャンシステムを用いたTRPV3の新規微結晶化条件の探索
32 福田 昌弘	東京大学 先進科学研究機構	Structural and functional analyses of pump-like channelrhodopsins
33 藤原 孝彰	東北大学多元物質科学研究所	テルペン環化酵素CotB2の室温結晶構造解析
34 保坂 俊彰	理研 BDR	Synthesis of photocaged L-tyrosine containing proteins through an Escherichia coli cell-free protein synthesis system for time-resolved structural analysis
35 松浦 滉明	理化学研究所 放射光科学研究センター	Development of an in-vacuum diffractometer for protein micro-crystallography
36 松岡 佑真	名古屋大学工学研究科	細胞外ループに着目したケモジェネティクスによるアデノシンA2A受容体の自在な制御
37 水鳥 律	名古屋工業大学大学院 工学専攻	Crystal structure of V2HeR3, a Viral heliorhodopsin transporting proton
38 水野 秀昭	Department of Chemistry, KU Leuven	Decarboxylation via two-photon absorption process results in efficient LSSmOrange photoconversion
39 水野 陽介	名古屋工業大学	Structural features of Lumi intermediate on a primate blue-sensitive visual pigment revealed by FTIR
40 光武 亜代理	明治大学理工学部物理学科	Analysis of protein simulations using relaxation mode analysis and 3D-RISM theory.
41 宮崎 育実	東京大学大学院理学系研究科	A caged lactate for light-induced biosensor activation
42 八木 清	理研CPR	非断熱QM/MM分子動力学計算法の開発と応用
43 山元 淳平	大阪大学大学院基礎工学研究科	Time-resolved serial femtosecond crystallography of light-induced structural changes of a bifunctional cryptochrome
44 横井 駿	Department of Physics, School of Science and Technology, Meiji University / Department of Structural Biology, School of Medicine, Stanford University	Structural and Computational Insight into Dynamics and Intermediate State in Activation of Orexin 2 Receptor
45 Luo Fangjia	JASRI	Time-resolved structure analysis enhanced by mixing and improved liquid injectors
46 長谷川 颯人	鳥取大学工学研究科	立体選択的なDiels-Alder反応を行う酵素の生成物結合型結晶構造とその反応過程の分子動画撮影に向けた取り組み

2023.11.29

## <夕食・宿泊・ポスターセッションのご案内>

### 夕食

グランドニッコー淡路内 コッコラーレ(buffet)

HP: <https://awaji.grandnikko.com/restaurant/coccolare/buffet.php>

料金: 4,950 円(税込)

※19:30-21:00(90分制)

※チェックアウト時に宿泊費と併せてお支払いください。

### buffetを希望されない方へ

夕食に館内レストランをご利用いただけます(<https://awaji.grandnikko.com/restaurant/>)。

朝食をルームサービスに変更される方は、ご利用前日(11/30)の21:00までにフロントへお申し出ください。(コンチネンタルブレックファースト追加料金無し、アメリカンブレックファースト+¥1000、和定食朝食+¥1,500)

### 宿泊

グランドニッコー淡路

HP: <https://awaji.grandnikko.com/> TEL: 0799-74-1111

お一人(税・サ・朝食込): シングル利用 14,850 円、ツイン利用 10,450 円、トリプル利用 9,350 円

チェックイン: 15:00~/チェックアウト: ~11:00

朝食: 7:00~10:00(最終入場)

※チェックインはまとめて手続きします。シンポジウム終了までにルームキーをお受け取りください。

※シンポジウム終了以降に到着される方は、ホテル受付にてチェックイン手続きをお願いします。

※チェックアウト時に、宿泊費・夕食費をお支払いください。領収書が必要な方は、ホテルフロントにてお申し出ください。

※自家用車で参加される方は、ホテルフロントにてお申し出ください。

※直前でのキャンセルは、キャンセル料が発生する場合があります。

### ポスターセッション

- ・掲示用パネルのサイズは、W900×H1800mm(掲示面)です。掲示用のピン等は会場にあります。
- ・ポスター準備時間にご自身で掲示をお願いします。
- ・懇親会は行いません。飲み物が必要な方は、各自お持ちください。

### 高速バスご利用の方へ

例年 12:15 会場前着の高速バスが混雑します。分散乗車をお願いします。