

研究業績

原著論文 (Articles)

Jun-ichi Wachino, Wanchun Jin, Chihiro Norizuki, Kouji Kimura, **Motonori Tsuji**, Hiromasa Kurosaki, Yoshichika Arakawa. Hydroxyhexylitaconic acids as potent IMP-type metallo- β -lactamase inhibitors for controlling carbapenem resistance in Enterobacterales. *Microbiology Spectrum*, 2024.

Bunki Natsumoto, Hirofumi Shoda, Yasuo Nagafuchi, Mineto Ota, Takashi Okumura, Yumi Horie, Tomohisa Okamura, Kazuhiko Yamamoto, **Motonori Tsuji**, Makoto Otsu, Hideki Taniguchi, Keishi Fujio. Functional evaluation of rare OASL variants by analysis of SLE patient-derived iPSCs. *Journal of Autoimmunity*, 139, 103085, 2023.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening and Quantum Chemistry Analysis for SARS-CoV-2 RNA-Dependent RNA Polymerase Using the ChEMBL Database: Reproduction of the Remdesivir-RTP and Favipiravir-RTP Binding Modes Obtained from Cryo-EM Experiments with High Binding Affinity. *Int. J. Mol. Sci.*, 23, 11009, 2022.

Riho Tateyama-Makino, Mari Abe-Yutori, Taku Iwamoto, Kota Tsutsumi, **Motonori Tsuji**, Satoru Morishita, Kei Kurita, Yukio Yamamoto, Eiji Nishinaga, Keiichi Tsukinoki. The inhibitory effects of toothpaste and mouthwash ingredients on the interaction between the SARS-CoV-2 spike protein and ACE2, and the protease activity of TMPRSS2 *in vitro*. *PLOS ONE*, 16, e0257705, 2021.

Norio Ogata, Hideaki Tagishi, **Motonori Tsuji**. Inhibition of Acetylcholinesterase by Wood Creosote and Simple Phenolic Compounds. *Chem. Pharm. Bull.*, 68, 1193-1200, 2020.

Uranan Tumkosit, Uamporn Siripanyaphinyo, Naokazu Takeda, **Motonori Tsuji**, Yusuke Maeda, Kriangsak Ruchusatsawat, Tatsuo Shioda, Hiroto Mizushima, Prukswan Chetanachan, Pattara Wongjaroen, Yoshiharu Matsuura, Masashi Tatsumi, Atsushi Tanaka. Anti-Chikungunya Virus Monoclonal Antibody Inhibiting Viral Fusion and Release. *J. Virol.*, 94, e00252-20, 2020.

Motonori Tsuji*. Potential Anti-SARS-CoV-2 Drug Candidates Identified through Virtual Screening of the ChEMBL Database for Compounds That Target the Main Coronavirus Protease. *FEBS Open Bio*, 10, 995-1004, 2020.

Wei Yang, Zaiqiang Yu, Mari Chiyoya, Xu Liu, Kazuyuki Daitoku, Shigeru Motomura, Tadaatsu Imaizumi, Ikuo Fukuda, Ken-Ichi Furukawa, **Motonori Tsuji**, Kazuhiko Seya. Menaquinone-4 Accelerates Calcification of Human Aortic Valve Interstitial Cells in High-Phosphate Medium through PXR. *J. Pharmacol. Exp. Ther.*, 372, 277-284, 2020.

Motonori Tsuji*. Antagonist-Perturbation Mechanism for Activation Function-2 Fixed Motifs: Active Conformation and Docking Mode of Retinoid X Receptor Antagonists. *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 31, 577-585, 2017.

Motonori Tsuji*. Koichi Shudo, Hiroyuki Kagechika. Identifying the Receptor Subtype Selectivity of Retinoid X and Retinoic Acid Receptors via Quantum Mechanics. *FEBS Open Bio*, 7, 391-396, 2017.

Motonori Tsuji*. A Ligand-Entry Surface of the Nuclear Receptor Superfamily Consists of the Helix H3 of the Ligand-Binding Domain. *J. Mol. Graph. Model.*, 62, 262-275, 2015.

Motonori Tsuji*. Koichi Shudo, Hiroyuki Kagechika. Docking Simulations Suggest that All-*trans* Retinoic Acid Could Bind to Retinoid X Receptors. *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 29, 975-988, 2015.

Motonori Tsuji*. Geometrical Dependence of the Highest Occupied Molecular Orbital in Bicyclic Systems: π Facial Stereoselectivity of Bicyclic and Tricyclic Olefins. *Asian J. Org. Chem.*, 4, 659-673, 2015.

Motonori Tsuji*. Local Motifs Involved in the Canonical Structure of the Ligand-Binding Domain in the Nuclear Receptor Superfamily. *J. Struct. Biol.*, 185, 355-365, 2014.

辻一徳*. 構造ベース創薬支援システム、HMHC および DSHC の開発 (Development of the Structure-based Drug Design Systems, HMHC and DSHC.) . *Mol. Sci.*, 1, NP004, 2007.

辻一徳*. 有機合成化学者のための論理的ドラッグデザイン (Rational Drug Design for Organic Chemists) . 分子機能研究所 (*Institute of Molecular Function*) , 1-6, 2006.

Motonori Tsuji*. Most Stable Conformation of the Cyclopropane Ring Attached at a Carbon Atom in a 1,2-Dicarba-*closo*-dodecaborane(12) System. *J. Org. Chem.*, 69, 4063-4074, 2004.

Motonori Tsuji*. On Attempts at Generation of Carboranyl Carbocation. *J. Org. Chem.*, 68, 9589-9597, 2003.

Motonori Tsuji, Yukiko Koiso, Hiroyasu Takahashi, Yuichi Hashimoto, Yasuyuki Endo. Modulators of Tumor Necrosis Factor α Production Bearing Dicarba-*closo*-dodecaborane as a Hydrophobic Pharmacophore. *Biol. Pharm. Bull.*, 23, 513-516, 2000.

Yasuyuki Endo, Kyoko Yaguchi, **Motonori Tsuji**, Kentaro Yamaguchi, Koichi Shudo. Functionalization of Polymethylcarboranes. Preparation and Reactivity of 2,3,4,5,6,7,8,9,10,11-Decamethyl-1,12-dicarba-*closo*-dodecaborane(12)-1-carboxylic Acid. *Chem. Pharm. Bull.*, 47, 699-701, 1999.

Masayuki Ebisawa, Hiroki Umemiya, Kiminori Ohta, Hiroshi Fukasawa, Emiko Kawachi, Ghislaine Christoffel, Hinrich Gronemeyer, **Motonori Tsuji**, Yuichi Hashimoto, Koichi Shudo, Hiroyuki Kagechika. Retinoid X Receptor-Antagonistic Diazepinylbenzoic Acids. *Chem. Pharm. Bull.*, 47, 1778-1786, 1999.

Toru Iijima, Yasuyuki Endo, **Motonori Tsuji**, Emiko Kawachi, Hiroyuki Kagechika, Koichi Shudo. Dicarba-*closo*-dodecaboranes as a Pharmacophore. Retinoidal Antagonists and Potential Agonists. *Chem. Pharm. Bull.*, 47, 398-404, 1999.

辻一徳*. ビシクロおよびスピロオレフィンの反応面選択性を決定する軌道相互作用. 東京大学, 博士 (薬学) 論文, 第 13735, 1-172, 1998.

Kiminori Ohta, **Motonori Tsuji**, Emiko Kawachi, Hiroshi Fukasawa, Yuichi Hashimoto, Koichi Shudo, Hiroyuki Kagechika. Potent Retinoid Synergists with a Diphenylamine Skeleton. *Biol. Pharm. Bull.*, 21, 544-546, 1998.

Motonori Tsuji, Tomohiko Ohwada, Koichi Shudo. Facial Selectivities of Benzofluorenes Bearing a Carbonyl, an Olefin, or a Diene Group in Spiro Geometry. π Spiro Substituent Effects. *Tetrahedron Lett.*, 39, 403-406, 1998.

Toshihiko Tashima, Hiroyuki Kagechika, **Motonori Tsuji**, Hiroshi Fukasawa, Emiko Kawachi, Yuichi Hashimoto, Koichi Shudo. Polyenyldiene Thiazolidine Derivatives with Retinoidal Activities. *Chem. Pharm. Bull.*, 45, 1805-1813, 1997.

Motonori Tsuji, Tomohiko Ohwada, Koichi Shudo. A Cyclopropyl Group Shows Reverse Facial Selectivity Depending on the Bicyclic Ring System. *Tetrahedron Lett.*, 38, 6693-6696, 1997.

Tomohiko Ohwada, Masanobu Uchiyama, **Motonori Tsuji**, Iwao Okamoto, Koichi Shudo. Orbital Unsymmetrization of Olefins Arising from Non-Equivalent Orbital Interactions. σ - π Coupling in Bicyclo[2.2.2]octenes. *Chem. Pharm. Bull.*, 44, 296-306, 1996.

Tomohiko Ohwada, **Motonori Tsuji**, Iwao Okamoto, Koichi Shudo. A Remote Substituent Can Determine Magnitude of Facial Selectivity in Benzobicyclo[2.2.2]octatrienes. *Tetrahedron Lett.*, 37, 2609-2612, 1996.

Motonori Tsuji, Eiichi Kuwano, Tetsuya Saito, Morifusa Eto. Root Growth-Promoting Activities of *N*-Acyl-L-proline Derivatives. *Biosci. Biotech. Biochem.*, 56, 778-782, 1992.

Motonori Tsuji*. Synthesis and Plant Growth Regulation Activity of *N*-Acyl-L-proline Derivatives. 九州大学, 修士 (農学) 論文, 第 1964, 1-63, 1992.

Motonori Tsuji*. Synthesis and Biological Activity of Abscisic Acid Mimics. 九州共立大学, 学士 (工学) 論文, 第 3398, 1-45, 1990.

その他査読付欧米学術誌掲載論文 (Other Articles)

Toshihiko Tashima, Hiroyuki Kagechika, **Motonori Tsuji**, Hiroshi Fukasawa, Emiko Kawachi, Yuichi Hashimoto, and Koichi Shudo. ChemInform Abstract: Polyenylidene Thiazolidine Derivatives with Retinoidal Activities. *ChemInform.*, 29, 2010.

Tomohiko Ohwada, **Motonori Tsuji**, Iwao Okamoto, and Koichi Shudo. ChemInform Abstract: A Remote Substituent Can Determine Magnitude of Facial Selectivity in Benzobicyclo[2.2.2]octatrienes. *ChemInform.*, 27, 2010.

書籍 (Books)

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル 2 (初版) . 分子機能研究所, 54 頁, 2018, ISBN: 978-4-9902513-5-2.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル 2 (初版) . 分子機能研究所, 34 頁, 2018, ISBN: 978-4-9902513-4-5.

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル (第五版) . 分子機能研究所, 108 頁, 2010, ISBN: 978-4-9902513-2-1.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (第六版) . 分子機能研究所, 133 頁, 2010, ISBN: 978-4-9902513-1-4.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem リファレンス (第四版) . 分子機能研究所, 22 頁, 2010, ISBN: 978-4-9902513-3-8.

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル (第四版) . 分子機能研究所, 2009.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (第五版) . 分子機能研究所, 2009.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem リファレンス (第三版) . 分子機能研究所, 2009.

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル (第三版) . 分子機能研究所, 2008.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (第四版) . 分子機能研究所, 2008.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem リファレンス (第二版) . 分子機能研究所, 2008.

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル (第二版) . 分子機能研究所, 2007.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (第三版) . 分子機能研究所, 2007.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem リファレンス (初版) . 分子機能研究所, 2007.

辻一徳*. Docking Study with HyperChem マニュアル (初版) . 分子機能研究所, 2006.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (第二版) . 分子機能研究所, 2006.

辻一徳*. Homology Modeling Professional for HyperChem マニュアル (初版) . 分子機能研究所, 2005.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Reference for HyperChem. 1st ed. Institute of Molecular Function, pp.62, 2005, ISBN: 4-9902513-0-X.

特許 (Patents)

Motonori Tsuji, Tetsuya Yoshida, Masashi Asakai, Masaya Tojo, Jyun Watanabe, Hideyuki Otsuka, Shusaku Koie, Masaki Okubo. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2014-120386, 2014.

Masaki Okubo, Motonori Tsuji, Masashi Asakai, Masaya Tojo, Masami Ito. Charge Control Agent and Toner Using Same. WO2014017298, 2014.

Masaki Okubo, Masami Ito, Motonori Tsuji, Masaya Tojo, Masashi Asakai, Tetsuya Yoshida. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2014-056083, 2014.

Masaki Okubo, Ikuo Kimura, Masami Ito, Motonori Tsuji, Takeshi Yamamoto, Masaya Tojo, Masashi Asakai, Tetsuya Yashida. Charge Control Agent and Toner Using Same. WO2015046214, 2013.

Makoto Nagaoka, Shuichi Hayashi, Motonori Tsuji, Yoshikazu Aoki. Organic Electroluminescence Device. WO2013179536, 2013.

Ikuo Kimura, Motonori Tsuji, Masaya Tojo, Masashi Asakai. Charge Control Agent and Toner Using Same. WO2013129015, 2013.

Masaki Okubo, Motonori Tsuji, Masami Ito, Masaya Tojo, Masashi Asakai, Tetsuya Yoshida. Charge Control Agent and Toner Using Same. WO2015046255, 2013.

Masaki Okubo, Motonori Tsuji, Masashi Asakai, Masaya Tojo, Masami Ito, Takeshi Yamamoto, Tetsuya Yoshida. Polymerized Toner Comprising Cyclic Phenol Sulfide. WO2014077288, 2012.

Ikuo Kimura, Motonori Tsuji, Masashi Asakai. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2012-043209, 2012.

Ikuo Kimura, Motonori Tsuji, Masaya Tojo, Masashi Asakai. Charge Control Agent and Toner

Using Same. WO2012102137, 2012.

Ikuo Kimura, Masami Ito, **Motonori Tsuji**, Masashi Asakai. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2012-005775, 2012.

Ikuo Kimura, **Motonori Tsuji**, Masami Ito, Masaya Tojo, Kanae Hiraishi. Charge Control Agent and Toner Using Same. WO2012035990, 2012.

Ikuo Kimura, **Motonori Tsuji**, Masashi Asakai. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2011-249223, 2011.

Ikuo Kimura, **Motonori Tsuji**, Masaya Tojo, Masashi Asakai, Toshihiko Kubota. Charge Control Agent and Toner Using Same. JP2011-071572, 2011.

Masateru Yasumura, Masami Ito, **Motonori Tsuji**, Masaya Tojo, Masataka Sawano, Kanae Hiraishi. Polymerized Toner Comprising Cyclic Phenol Sulfide. WO2011016519, 2011.

辻一徳*. 生体高分子における相互作用部位の予測方法. JP2007-299125, 2006.

著作物 (学術ソフトウェア) (Software)

Motonori Tsuji*. AutoDock Vina In Silico Screenings Interface, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision H1, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision H1, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision H1, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision H1, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision H1, Institute of Molecular Function, 2018.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision G1.2, Institute of Molecular Function, 2017.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision G1.2, Institute of Molecular Function, 2017.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision G1.2, Institute of Molecular Function, 2017.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision G1.1, Institute of Molecular Function, 2016.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision G1.1, Institute of Molecular Function, 2016.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision G1.1, Institute of Molecular Function, 2016.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision G1.1, Institute of Molecular Function, 2016.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision G1.1, Institute of Molecular Function, 2016.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision G1, Institute of Molecular Function, 2015.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision G1, Institute of Molecular Function, 2015.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision G1, Institute of Molecular Function, 2015.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision G1, Institute of Molecular Function, 2015.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision G1, Institute of Molecular Function, 2015.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision F3, Institute of Molecular Function, 2014.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision F3, Institute of Molecular Function, 2014.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision F3, Institute of Molecular Function, 2014.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision F3, Institute of Molecular Function, 2014.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision F3, Institute of Molecular Function, 2014.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision F2, Institute of Molecular Function, 2012.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision F2, Institute of Molecular Function, 2012.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision F2, Institute of Molecular Function, 2012.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision F2, Institute of Molecular Function, 2012.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision F2, Institute of Molecular Function, 2012.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision F1, Institute of Molecular Function, 2010.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision F1, Institute of Molecular Function, 2010.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision F1, Institute of Molecular Function, 2010.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision F1, Institute of Molecular Function, 2010.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision F1, Institute of Molecular Function, 2010.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision E2, Institute of Molecular Function, 2009.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision E2, Institute of Molecular Function, 2009.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision E2, Institute of Molecular Function, 2009.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision E2, Institute of Molecular Function, 2009.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision E2, Institute of Molecular Function, 2009.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision E1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision E1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision E1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision E1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision E1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision D1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision D1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision D1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision D1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision D1, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision C2, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision C2, Institute of Molecular Function, 2008.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision C2, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision C2, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision C2, Institute of Molecular Function,

2007.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision C1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision C1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision C1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision C1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision C1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision B1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision B1, Institute of Molecular Function, 2007.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision B1, Institute of Molecular Function, 2006.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision B1, Institute of Molecular Function, 2006.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision B1, Institute of Molecular Function, 2006.

Motonori Tsuji*. Virtual Screening System, Revision A2, Institute of Molecular Function, 2006.

Motonori Tsuji*. Docking Study with HyperChem, Revision A2, Institute of Molecular Function, 2006.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling Professional for HyperChem, Revision A3, Institute of Molecular Function, 2005.

Motonori Tsuji*. ONIOM Interface for Receptor, Revision A3, Institute of Molecular Function, 2005.

Motonori Tsuji*. Gaussian Interface for HyperChem, Revision A3, Institute of Molecular Function, 2005.

Motonori Tsuji*. Homology Modeling for HyperChem, Revision A3, Institute of Molecular Function, 2005.

Motonori Tsuji*. Ab Initio Protein 3D Modeling, 2002.

Motonori Tsuji*. Protein Secondary Structure Prediction, 2002.

特記事項 (取材記事) (News Paper)

「分子機能研究所が大学との共同研究を推進：がん治療薬など、受託事業へも弾み」. CCSnews (オンライン) 記事、2023年11月7日.

「創薬受託研究が好調推移：創立20周年でキャンペーンも」. 化学工業日報、2023年6

月 29 日、7 面.

「分子機能研究所がコロナ感染症治療薬の候補物質をリスト化：全系量子化学計算で解析、有用性高い医薬品開発に道」. CCSnews (オンライン) 記事、2022 年 9 月 27 日.

「医療系受託研究の依頼増：コロナ関連や拮抗剤設計など」. 化学工業日報、2022 年 6 月 29 日、7 面.

「コロナ治療薬探索で注目：SBDD 技術コアに受託研究」. 化学工業日報、2021 年 6 月 30 日、7 面.

「新型コロナの研究で成果：大規模仮想スクリーニング」. 化学工業日報、2020 年 7 月 16 日、7 面.

「分子機能研究所が新型コロナウイルスの医薬品候補化合物：インシリコ創薬技術で発見、既存薬 64 品目と結合親和性高い 29 物質をリスト化」. CCSnews (オンライン) 記事、2020 年 5 月 9 日.

「分子機能研究所がインシリコ創薬受託研究サービス：低料金・高精度で実績、SBDD 分野の幅広い計算化学技術に対応」. CCSnews (オンライン) 記事、2019 年 9 月 5 日.

「独自技術で創薬研究支援：高度な計算化学機能を搭載」. 化学工業日報、2019 年 6 月 17 日、9 面.

「ドッキング解析機能を拡充：外部ソフトとの連携強化」. 化学工業日報、2018 年 6 月 21 日、9 面.

「分子機能研究所がインシリコ創薬機能を大幅強化、容易にタンパク質の全系量子力学計算、Vina によるスクリーニング自動化も」. CCSnews (オンライン) 記事、2018 年 3 月 9 日.

「ONIOM 法と独自に連携：複合体構造を精密解析」. 化学工業日報、2017 年 6 月 21 日、9 面.

「分子機能研究所が「HyperChem」の取り扱いを開始：分子構築から計算化学まで統合、独自開発 SBDD ツールと連携」. CCSnews (オンライン) 記事、2017 年 5 月 17 日.

「分子機能研究所の辻代表らが核内受容体のサブタイプ選択性を予測、ヘテロダイマー構造が関係、ONIOM/FMO 法で全系量子力学計算」. CCSnews (オンライン) 記事、2017 年 3 月 15 日.

「分子機能研究所：ONIOM 対応を強化、たんぱくの全系計算に対応」. 化学工業日報、2016 年 6 月 24 日、9 面.

「分子機能研究所が核内受容体の創薬への応用に道：独自の仮説で MD シミュレーションに成功、リガンド認識機構の原理解明」. CCSnews (オンライン) 記事、2015 年 12 月 29 日.

「分子機能研究所：スクリーニング機能高速化、独自手法の創薬ソフト」. 化学工業日報、2015 年 6 月 25 日、9 面.

「分子機能研究所の辻代表が反応面立体選択性で新モデル提唱：フロンティア軌道理論を拡張、矛盾・例外事例をすべて説明」. CCSnews (オンライン) 記事、2015 年 5 月 8 日.

「分子機能研究所の辻代表がたん白質のフォールディングで新発見：アミノ酸のシグナル配列が全体構造を規定、創薬指針への適用も」. CCSnews (オンライン) 記事、2014年2月8日.

「分子機能研究所:独自技術で創薬支援ソフト、ドッキング解析で新手法」. 化学工業日報、2008年6月26日、6面.

「分子機能研究所：高度機能を使いやすく提供、独自ノウハウの SBDD」. 化学工業日報、2007年6月29日、6面.

「次世代構造ベースの創薬支援システムを開発・販売する」. 国際グラフ、2007年2月、290号、53頁.

「薬物・たん白質ドッキング解析：マルチ化合物版を投入、分子機能研が新ツール、1万個まで自動化」. 化学工業日報、2006年11月24日、9面.

「分子機能研究所がドッキング解析ツールのマルチ化合物対応版：最大1万化合物を自動的に解析、高精度計算を実現」. CCSnews (オンライン) 記事、2006年11月21日.

「分子機能研究所：論理性重視の創薬支援、日米欧での販売体制も確立」. 化学工業日報、2006年6月29日、6面.

「分子機能研究所：受容体相互作用部位を自動探索：SBDD統合システム開発、標的たん白質と医薬分子、論理的ドッキング解析」. 化学工業日報、2006年5月30日、9面.

「分子機能研究所が論理性重視の SBDD システムを開発：たん白質の結合部位を独自手法で予測、バーチャルスクリーニングへの発展も」. CCSnews (オンライン) 記事、2006年5月27日.

「分子機能研究所:たん白質量子化学計算 ONIOM 法、完全 GUI 化を実現」. 化学工業日報、2006年1月5日、8面.

「分子機能研究所が完全 GUI ベースで Gaussian/ONIOM 法に対応：HyperChem 向け拡張ソフトを開発、創薬研究に新たな道」. CCSnews (オンライン) 記事、2005年12月28日.

「研究開発に新たな方法論開く CCS」. 化学工業日報、2005年12月8日、5面.

「分子機能研：創薬支援ソフトを独自開発、再現性高い論理的モデリングが可能」. 化学工業日報、2005年10月31日、9面.

「分子機能研究所が創薬支援ソフトを独自開発：HyperChem にたん白質解析機能、再現性の高い論理的ホモロジーモデリング」. CCSnews (オンライン) 記事、2005年10月27日.

報道関係資料 (Press Release)

分子機能研究所が大阪大学、京都府立医科大学とがん治療薬の開発を目指した共同研究を開始、2023年11月1日.

分子機能研究所がインシリコスクリーニングで有効成分を発見：民間研究機関からロイヤリティを受領、2023年10月23日.

新型コロナウイルス (COVID-19) 治療薬候補化合物リストを発表：世界最高水準のコンビ

ユータシミュレーションによる医薬品分子設計方法論で成果、2022年9月21日.

ハミガキなどに使われる成分が口腔内における新型コロナウイルスの主要感染経路を阻害、2021年10月4日.

抗新型コロナウイルス (SARS-CoV-2) 薬の医薬品候補リストを発表、2020年5月9日.

量子力学計算により医薬品の受容体サブタイプ選択性の予測・再現に成功、2017年2月15日.

核内受容体スーパーファミリーにおけるリガンド認識機構の原理の解明に成功、2015年11月4日.

有機化学反応における重要未解決問題である反応面立体選択性の本質的原理の解明に成功、2015年4月17日.

アミノ酸配列 (一次構造) からタンパク質の立体構造 (三次構造) が形成されるメカニズムの一端を原子・電子レベルで解明することに成功、医薬品や農薬が効果を示すメカニズムの一端を明らかにした、2013年12月23日.

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function) がコンピュータ上で医薬候補化合物をスクリーニングできるシステムを国産としては初めて国内外の一般市場で販売開始する、2006年11月16日.

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function) が、疾患に関わるタンパク質の立体構造のみから、その疾患に対する医薬候補化合物を高精度に予測できる世界初の革新技术を開発、2006年5月8日.

Institute of Molecular Function が「HyperChem」から「Gaussian」を実行するためのインターフェイス「Gaussian Interface for HyperChem」を開発、これにより世界最強計算化学環境を実現、2005年8月22日.

Institute of Molecular Function が高性能タンパクモデリング支援システム「Homology Modeling for HyperChem」を開発、2005年7月11日.