

2021

東京大学B I N D Sユニット連携講習会

zoom利用
オンライン
講習会

参加費
無料

事前登録
要

2021.
10.1 Fri.
13:00 ~ 17:30

講師

岩崎 憲治（筑波大学・生存ダイナミクス研究センター）
鈴木 博文（早稲田大学 ナノ・ライフ創新研究機構）
富井 健太郎（産業技術総合研究所 人工知能研究センター）
関嶋 政和（東京工業大学 情報理工学院）

司話人

寺田 透（東京大学大学院農学生命科学研究科）
田之倉 優（東京大学大学院農学生命科学研究科）

下記URLまたはQRコードからお申し込みください

<https://www.binds-registration.info/regi/72>

- ※ 講習会の数日前に視聴方法や資料・注意事項をご連絡いたします。
- ※ 視聴方法の転送不可（参加ご希望の方は個別にお申し込みください）。
- ※ 各自のPCで実習を行うハンズオン講習会です。（Windows, Macは問いません）
- ※ ご入力いただきました個人情報は、参加者への事務連絡、統計分析以外には使用いたしません。



お問い合わせ先



創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム（BINDS）
プラットフォーム機能最適化ユニット支援オフィス
assist@g.ecc.u-tokyo.ac.jp
TEL:03-5841-5167 / FAX:03-5841-8031



講習会 概要

創薬やライフサイエンス研究開発を強力に推進する AMED は「創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業」で BINDS を起ち上げ、永年にわたりわが国が築き上げてきた生命の源であるタンパク質の構造解析の優れた研究成果、数多くの経験や人材、夥しい機器・施設を結集して、さまざまな分野の研究者を支援して参りました。本事業では、第一線の研究に携わる関係者が連携して、シンポジウム、ワークショップ等で最新の知見を披露してきましたが、東京大学の過去 4 度にわたる PC を活用した講習会はいずれも高い評価を受けております。

今年度は新型コロナウイルスの流行により、対面での講習会の実施が困難なため、昨年度に引き続きオンラインによる講習会を実施します。本講習会では4人の講師がタンパク質の立体構造・機能解析に関する最新の研究成果を紹介します。受講者の皆様には、講演に合わせてお手元の PC で実習をしていただく予定です。本講習会が、研究成果をより深く理解する一助となるよう準備しておりますので、多くの皆様のご参加をお待ちしております。

プログラム

※1講演80分予定。講演の順番は未定です

「クライオ電子顕微鏡単粒子解析の原理とデータベース」

岩崎 憲治（筑波大学・生存ダイナミクス研究センター）
鈴木 博文（早稲田大学 ナノ・ライフ創新研究機構）

クライオ電子顕微鏡単粒子解析を使用したタンパク質の構造解析は、我が国でも整備が急速に進み、以前に比して利用のチャンスが増えてきた。クライオ電子顕微鏡に関するセミナーや講習会に触れる機会も多いのではないだろうか。本講習では、前半に単粒子解析法の原理をおさらいし、鏡像体を形成する人工ナノケージの解析を例にその応用を学ぶ。後半は、3 次元電子顕微鏡データナビゲーター「EM-Navigator (<https://pdbj.org/emnavi/?lang=ja>)」を使った実習を行う。クライオ電子顕微鏡単粒子解析の結果を用いて、生体分子の原子座標をモデリングした図を数々の論文で目にするようになった。そのため、そのモデル構造を元に生物学的、化学的議論が直接展開されるようになった一方で、実際に得られたクライオ電子顕微鏡解析データ自身を吟味することが減った。また、試料作製法や撮影条件、用いた解析ソフトウェアなどを素早く調べたいときはないだろうか。そのような時に威力を発揮するのがこの EM-Navigator である。実際にその使い方を開発者自身がレクチャーする。

「データベース PoSSuM によるタンパク質の基質結合部位の解析」

富井 健太郎（産業技術総合研究所 人工知能研究センター）

タンパク質の機能解析にとって、結合基質や結合部位の推定は大きな手がかりを与える。われわれが開発を続けている PoSSuM(<http://possum.cbrc.jp/PoSSuM/>) は、タンパク質の既知立体構造情報に基づき、(候補を含む) 基質結合部位間の幾何学的および物理化学的類似性の網羅的検索結果をまとめたデータベースである。2011 年の初リリース以来成長を続け、現在では、およそ 50 万の基質結合部位と 900 万の仮想的結合部位の、あわせて 950 万以上にのぼる部位から発見された約 1.6 億の類似ペアに関する情報を提供している。仮想的結合部位の既知基質結合部位との類似性は、結合基質や結合部位を示唆するものとなる。本講習会では、データベースの内容とその構築方法、またいくつかの例を用いてデータベースの利用法等について紹介する。

「AI とシミュレーションによる新型コロナウイルス治療薬探索」

関嶋 政和（東京工業大学 情報理工学院）

2019 年 12 月の中国武漢から広まった新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) の世界的な蔓延は、ワクチンの開発と接種により、押さえ込みの道筋が見えてきたように感じられる。一方で、変異株によってはワクチンの効果が薄いという報告もあり、蔓延防止の為のワクチン接種と、治療薬探索は両輪で行われる必要があると考えられる。従来は、上市薬からのドラッグリポジショニングの観点で治療薬探索が行われることが多かったが、今後も繰り返し蔓延の可能性のある SARS-CoV については、基本に立ち返りヒット化合物の発見から行っていく必要があると考えている。ここでは、AI とシミュレーションを用いたヒット化合物について我々の研究を元に議論を行っていきたいと考えている。