

参加費無料

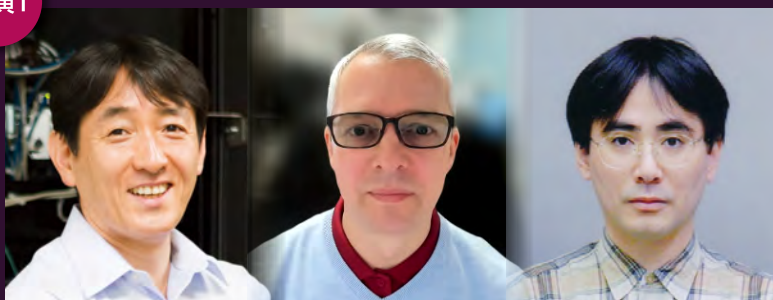
オンライン開催

2023  
年度

# BINDSユニット連携講習会

2023  
10/20 Fri  
16:00~19:00

講演1



吉川 雅英 (構造解析ユニット) Radostin Danev (構造解析ユニット) 柳澤 春明 (構造解析ユニット)

東京大学大学院医学系研究科

「クライオ電子線トモグラフィデータの活用」

講演2



福澤 薫 (インシリコ解析ユニット)

大阪大学大学院薬学研究科

「フラグメント分子軌道法に基づくタンパク質の相互作用解析」

世話人



西山 真 (BINDS 司令塔・調整機能活動サポート班)  
東京大学大学院  
農学生命科学研究科



寺田 透 (インシリコ解析ユニット)  
東京大学大学院  
農学生命科学研究科

実習形式の講習会です。  
ご参加をお待ちしております♪

要事前登録：下記 URL または QR コードからお申し込みください 申込締切 10月19日

<https://www.binds-registration.info/regi/139>

## 注意事項

- ※講習会の前日までに視聴方法や資料・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）。
- ※講演では実習を行いますので、PCをご用意ください。（講演2の実習はWindowsでのご参加を推奨いたします）
- ※取得した個人情報は、参加者への事務連絡、統計分析等、本事業以外には使用いたしません。



お問い合わせ

創業等先端技術支援基盤プラットフォーム (BINDS)  
生命科学・創薬研究支援基盤事業 (BINDS) サポート班

✉ assist@binds.jp  
TEL: 03-5841-5167 / FAX: 03-5841-8031

binds.jp



## 講習会概要

日本医療研究開発機構（AMED）が実施する「生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）」では、創薬・ライフサイエンス研究を、強力に推進しております。本講習会では、BINDS 事業で得られた研究成果を、実習を交えてわかりやすく解説します。今回は、本 BINDS 事業の構造解析ユニットの東京大学大学院医学系研究科の吉川雅英教授のグループから、吉川雅英教授、Radostin Danev 教授、柳澤春明講師により、クライオ電子線トモグラフィーをご紹介します。また、インシリコ解析ユニットの大阪大学大学院薬学研究科の福澤薫教授からは、フラグメント分子軌道法と、タンパク質の相互作用解析への応用についてご講演いただきます。本講習会は、オンラインで実施します。一部の演題では、受講者の皆様に、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

司会（世話人） 西山 真、寺田 透

**16:00 ~ 16:03** 「オープニング」 西山 真（東京大学大学院農学生命科学研究科）

**16:03 ~ 16:10** 「挨拶」 善光 龍哉（国立研究開発法人 日本医療研究開発機構）

**16:10 ~ 17:30** 「クライオ電子線トモグラフィーデータの活用」 ※一部英語でのご講演が含まれます。  
吉川 雅英 / Radostin Danev / 柳澤 春明（東京大学大学院医学系研究科）

2017 年に AMED/BINDS による Cryo-EM 支援が始まってから、Cryo-EM を使うユーザーは急速に増えてきました。これは、クライオ電子顕微鏡の手法の中でも、単粒子解析と呼ばれる手法が急速に広まってきたことで、X線結晶解析とは異なる形で分子の原子モデルが組み立てられるようになったからです。一方、トモグラフィーは細胞生物学と構造生物学の狭間にあり、まだ日本では多くの方が使っている手法とは言えません。そこで、本講習会ではクライオ電子線トモグラフィーのデータに実際に触れていただき、どのような事がそこからわかるのか、を実習形式で体験していただきます。

**17:30 ~ 17:35** 休憩

**17:35 ~ 18:55** 「フラグメント分子軌道法に基づくタンパク質の相互作用解析」  
福澤 薫（大阪大学大学院薬学研究科） ※一部ソフトウェアの使用に支障がでる可能性があるため、Windows が使える PC をできるだけ準備ください。

フラグメント分子軌道法（FMO 法）は、タンパク質や核酸などの生体高分子を丸ごと量子化学計算し、分子全体のエネルギーや電子密度、フラグメント間の相互作用エネルギーを得ることができる理論手法である。実験的に構造解析されたタンパク質複合体の FMO 計算を行うことで、複合体内の分子内・分子間相互作用を定量的に解析し、物理化学的に解釈することができる。これまでに「京」や「富岳」などのスーパーコンピュータを用いて計算したデータは、FMO データベース (<https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>) から一般公開されている。本講習会では、FMO データベースに収載されているデータを用いて、FMO 法による定量的な相互作用解析から実験構造を解釈する手順について紹介する。

**18:55 ~ 19:00** 「クロージング」 寺田 透（東京大学大学院農学生命科学研究科）

※プログラムは都合により変更になる場合がありますので予めご了承ください。