

オンライン開催

2025年度 BINDSユニット連携講習会

2025年

10/31 金

参加費無料

録画配信あり
※参加登録者限定

16:00~19:00

講演 1



田辺 幹雄

(高エネルギー加速器研究機構 准教授)



坂井 直樹

(高輝度光科学研究センター 主幹研究員)

なぜ今タンパク質の構造解析をするのかー
タンパク質立体構造解析への基盤

講演 2



浴本 亨

(横浜市立大学 助教)

結合ポーズの安定性を問う：
ドッキング後に動かして選ぶ、確かな候補

世話人



西山 真

東京大学
教授



寺田 透

東京大学
教授

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30日

<https://www.binds-registration.info/regi/227>



注意事項

- ※講習会では実習を行います。PCをご用意ください（Windows, Mac は問いません）。
- ※講習会で使用するソフトウェア等の案内は数日前までに、視聴方法や資料・注意事項は前日までにご連絡いたします。
- ※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）。
- ※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

創薬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 サポート班

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

binds.jp



概要

シリーズ9回目を迎えるBINDSユニット連携講習会では、日本医療研究開発機構 (AMED) が我が国の創薬・ライフサイエンス研究を強力に後押しする「生命科学・創薬研究支援基盤事業 (BINDS)」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ています。今回は、本事業の構造解析ユニットとインシリコ解析ユニットの連携として、理化学研究所 放射光科学研究センターの山本雅貴部門長のグループから、高エネルギー加速器研究機構の田辺幹雄准教授と高輝度光科学研究センターの坂井直樹主幹研究員に、また、横浜市立大学大学院生命医科学研究科の池口満徳教授のグループから浴本亨助教にタンパク質立体構造に基づく創薬をテーマにドッキング計算に必要な解析ツールの概説とツール活用のコツなどについてご講演いただきます。ご参加の皆様にはオンラインで講習をお受けいただき、一部の演題では、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。本講習会を、研究成果のより深い理解への一助としていただきますよう、皆様のご参加をお待ちしております。

プログラム

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 教授 BINDS 司令塔・調整機能活動サポート班

開 会 挨拶 ▶ **AMED** | 国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 創薬事業部 医薬品研究開発課

講 演 1 ▶ **なぜ今タンパク質の構造解析をするのかータンパク質立体構造解析への基盤**



田辺 幹雄

高エネルギー加速器研究機構
准教授

構造解析ユニット



坂井 直樹

高輝度光科学研究センター
主幹研究員

構造解析ユニット

近年、クライオ電子顕微鏡を用いた単粒子解析や、AlphaFoldに代表される高精度な構造予測プログラムの発展も相まって、タンパク質の構造に関する研究は大きく変化してきました。本講習会では改めて、「なぜ構造解析を行うのか」「どのように生命現象の理解に活用するのか」という基礎的な問いから始め、実践的に構造を可視化するソフトウェアを使うことで、タンパク質の構造の見方とその利用法について幅広く学びます。また創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム事業 (BINDS) の有効活用法についても紹介し、参加者が実際に構造解析を行うにあたり必要な情報を提供いたします。初心者から経験者まで、構造生物学の知識を深めたい方々を対象としています。

講 演 2 ▶ **結合ポーズの安定性を問う：ドッキング後に動かして選ぶ、確かな候補**



浴本 亨

横浜市立大学 生命医科学研究科
助教

インシリコ解析ユニット

構造解析実験技術や構造予測技術の発展に伴い、大抵のタンパク質について立体構造情報が得られるようになってきました。昨年の講習会で体験したドッキングシミュレーションは立体構造モデルがあれば実行できるので、現在、大抵の創薬標的タンパク質でドッキングシミュレーションまで可能な状況にあります。では、静的構造ベースのドッキングシミュレーション後にスコア上位のリガンドを100個選べば必ず結合するものがあるか？一般に、ヒット率は1%程度とされていますが、0%のときもあります。ヒット率を上げるにはどうすればよいのか？そこで、結合するかどうかを、「構造揺らぎのある生体内でもその結合を維持できるのだろうか？」と捉え、動的構造が扱える分子動力学シミュレーション (MD) を導入します。タミフルとノイラミニダーゼのMDトラジェクトリ例を観察し有効性を体験していただきたいと思います。

実習時
の
お願い

講習で使用するソフトウェアはWindows、Macどちらでも利用できますが、説明はWindows版で行います。予めご了承ください。

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 教授 インシリコ解析ユニット