



BINDS ユニット連携講習会

平成30年11月13日(火)

13:30 ~ 17:30

13:00 より受付開始

主催: BINDS (創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム)
プラットフォーム機能最適化ユニット・インシリコユニット

共催: 東京大学大学院農学生命科学研究科
アグリバイオインフォマティクス教育研究ユニット



場所: 東京大学
弥生キャンパス農学部2号館
化学第1講義室 (2階227号室)
(〒113-8657 東京都文京区弥生1-1-1)

参加費: 無料

事前登録: 必要

定員: 50名 ※先着順

※ご参加には事前登録が必要です。

BINDS支援オフィス (assist@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 宛に「講習会参加希望」の表題でご一報ください。折り返しご案内や参加フォーム等をお送りします。

【講演者】

■寺田 透 (東京大学大学院情報学環 准教授)

「分子動力学シミュレーションによる分子間相互作用解析」

■由良 敬 (早稲田大学先進理工学部 教授)

「BINDS ウェブと生命科学総合データベース VaProS の利用」

■白井 剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)

「超分子立体構造モデリング超入門」



※講習会で使用するPCはすべて開催者側でご用意いたします。

【お問い合わせ】

〒113-8657 東京都文京区弥生1-1-1 東京大学大学院農学生命科学研究科内
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
TEL 03-5841-5167 FAX 03-5841-8031 E-mail assist@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp

講習会概要

タンパク質の構造解析や構造創薬の研究において、PCを利用したデータベース、ウェブアプリケーション（ソフトウェア）の活用は欠かせません。当講習会においては、BINDSのユニットを超えた2代表機関の代表研究者が連携協力して、これを駆使した実技型講習会を昨年引き続き開催することとなりました。初心者にもわかりやすく説明します。特に、タンパク質—リガンド系の研究事例を取り上げ、分子動力学シミュレーションを用いた解析方法の紹介や、生命科学のデータベース VaProS や BINDS による研究支援申請方法の紹介、BINDS での超高分子モデリングの取り組みの実例を講義形式で紹介しながら、実際にいくつかのアプリケーションを実習形式で体験をしていただきます。なお、PC(Windows 使用) はすべて開催者側で用意します。

講習会要旨

■寺田 透 (東京大学大学院情報学環 准教授)

「分子動力学シミュレーションによる分子間相互作用解析」

タンパク質は他のタンパク質や低分子化合物（リガンド）等と相互作用することで、その生物学上の機能を発揮します。タンパク質の機能を理解し、さらに薬剤等を用いてこれを制御するためには、相互作用のメカニズムに対する理解が欠かせません。分子を構成する各原子に働く力を用いて運動方程式を解き、原子の運動をコンピュータ上に再現する分子動力学法を用いると、分子間の相互作用を原子レベルで詳細に解析することができます。本講習会では、実際のタンパク質—リガンド系の研究事例を取り上げ、分子動力学シミュレーションを用いて分子間相互作用を解析する手法を紹介します。

■由良 敬 (早稲田大学先進理工学部 教授)

「BINDSウェブと生命科学総合データベースVaProSの利用」

創薬等先端支援技術プラットフォーム (BINDS) 事業では、生体高分子の構造解析、タンパク質生産、ケミカルシーズ・リードの探索と構造展開、ゲノミクス解析およびバイオインフォマティクス解析などの最先端技術をもつ研究者を集めてプラットフォームを構築し、さまざまな研究の支援活動を行っています。その一つの技術として、生命ビッグデータを解析する道具 VaProS をウェブで提供しています。BINDS のウェブを紹介するとともに、VaProS をどのように使うことで、どのようなことがわかるかを紹介します。

■白井 剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)

「超分子立体構造モデリング超入門」

タンパク質など生体分子複合体の立体構造は、すでに創薬研究の基本情報の一部となり、研究や論文に利用したいという要望も多くなっていますが、モデリングの手法・手順が確定してないこともありいまだに敷居は高いと認識されています。しかし近年の構造データベースの拡大により、超分子構造モデリングのための素材データは非常に充実してきています。この講演では BINDS での超分子モデリングの取り組みの実例を講義形式で紹介しながら、モデリングに利用できるいくつかのアプリケーションを実習形式で体験して頂きます。