

# 先進技術活用力養成講座(第1回)

## 構造ベース創薬セミナー

～地域リソースを活用したタンパク質結晶化、構造決定からドッキングスクリーニング入門～

今や創薬プロセスの常套手段となった Structure Based Drug Design (SBDD) は、標的タンパク質とより強く結合し(より強い生物活性)、より高い選択性を持った(副作用の少ない)医薬品のデザインに非常に有効な手段です。その課程は、タンパク質の発現・結晶化、構造決定を経てコンピュータ上での化合物デザイン・スクリーニングから成り立ちます。

このセミナーは、SBDD に関心を持つ大学院生、企業やアカデミアの若手研究者や、創薬プロジェクトメンバーの方々を対象とし、全体の流れを分かりやすく解説いたします。特に、タンパク質結晶化、構造解析、ドッキングシミュレーションの手法に焦点を置き、タンパク質結晶構造データ使用上の留意点(生体内における構造との違い)や、異なるシミュレーション手法の特色・強み等を専門の先生方に講義していただきます。

さらに、地域のリソース(CASS、SPring-8、京コンピュータ、FOCUS等)の活用・アクセス方法、そして今後予定されるより専門性の高い技術研修やセミナーの情報についてもご案内する予定です。SBDDの最新の技術を学び、活用力を養成する機会として是非ご参加ください。

**日時:** 2014年3月7日(金)10:00-17:00

**会場:** 公益財団法人 計算科学振興財団 計算科学センタービル 2階 [\[アクセス\]](#)

兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1番28号

最寄り駅「京コンピュータ前駅」(ポートライナー)より徒歩約3分

**主催:** 神戸大学連携創造本部

**協賛:** (公財)計算科学振興財団、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、  
理化学研究所放射光科学総合研究センター

**募集人員:** 25名程度

**対象者:** SBDDに関心をお持ちの大学院生、企業・アカデミアの若手研究者、創薬プロジェクトメンバー

**参加費:** 無料

**申込方法:** 氏名、所属、役職、メールアドレス、電話番号を明記のうえ、メールでお申込みください([hicd-tiiki-life@office.kobe-u.ac.jp](mailto:hicd-tiiki-life@office.kobe-u.ac.jp) 神戸大学連携創造本部 河野宛)。先着順にて、事務局よりご連絡いたします。なお、開催にあたって、参加者情報は講演者に提供されます。

\*本セミナーは、文部科学省「地域イノベーション戦略支援プログラム」における[「関西ライフイノベーション戦略プロジェクト」](#)の協力により開催されます。参加者には簡単なアンケートにご協力をお願いします。

## 構造ベース創薬セミナー

**日時:** 2014年3月7日(金)10:00-17:00

**会場:** (公財) 計算科学振興財団 計算科学センタービル2階 [[アクセス](#)]

|       |   |
|-------|---|
| 10:00 | はじめに<br>森 一郎 神戸大学連携創造本部   |
| 10:05 | 構造ベース創薬 (SBDD) の流れと地域の資源 タンパク質の結晶化<br>鶴田宏樹 神戸大学連携創造本部・応用構造科学産学連携推進センター (CASS) |
| 10:40 | SPring-8 (SACLA) : 創薬に向けたタンパク質構造解析 (応用事例と施設利用)<br>山本雅貴 理化学研究所放射光科学総合研究センター    |
| 11:30 | ブレイク  |
| 11:40 | タンパク質構造決定 ~各種法の強み・留意点<br>濱田大三 三重大学生物資源学研究科                                    |
| 12:30 | 昼食  |
| 13:30 | コンピュータを活用する創薬研究 ~バーチャルスクリーニング<br>佐藤秀行 オープンアイ・ジャパン株式会社                         |
| 14:20 | 精度の高い相互作用エネルギー解析: MD, FMO 入門 (基礎と応用)<br>田中成典 神戸大学大学院システム情報学研究科                |
| 15:00 | ブレイク  |
| 15:10 | MD を用いた創薬のための小分子・タンパク ~タンパク相互作用解析 (応用事例)<br>広川貴次 産業総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター   |
| 16:10 | スーパーコンピュータ「京」の創薬への活用に向けて (基礎と利用方法)<br>波内良樹 理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム          |
| 16:40 | FOCUS スパコン 新システムと創薬リソース紹介<br>西川武志 (公財) 計算科学振興財団                               |
| 17:00 | 終了 (希望者には FOCUS 見学を実施します)   |