

第24回日本蛋白質科学会年会



東ソー ランチョンセミナー

演題

蛋白質エンジニアリングによる モデル蛋白質再設計・抗体分子改造

日時

2024年6月11日(火) 12:00~12:50

会場

札幌コンベンションセンター 中ホール1/2

演者

真壁 幸樹 教授

山形大学大学院理工学研究科・JST さきがけ



要旨

蛋白質エンジニアリングは蛋白質のアミノ酸配列やドメイン連結を改変し、その機能や分子構造の調査や有用な蛋白質を生み出す技術である。本講演では、発表者がこれまで行ってきた蛋白質エンジニアリングの研究について、βシートモデル蛋白質の再設計と抗体分子の改変について紹介する。蛋白質の再設計では、偶然に単層βシート領域を介してドメインスワッピングすることを見だし、そのエンジニアリングから安定な二量体の設計に成功した例などを紹介する。また、抗体分子の改変では分離インテインやSpyCatcher/Tagを用いた蛋白質間の連結・ペアリングによって、自然界に存在しない環状のトポロジーを持つ小型二重特異性抗体や、天然の配列を維持したIgG型二重特異性抗体の構築について発表する。これらの結果を通して、蛋白質エンジニアリングの将来展望を概観する。

Day 1 (June 11)
Luncheon Seminar



東ソー株式会社
バイオサイエンス事業部

本社 / 〒104-0028 東京都中央区八重洲2-2-1

TEL 03-6636-3733

大阪支店 ☎(06)6209-1948

名古屋支店 ☎(052)211-5730

福岡支店 ☎(092)710-6694

仙台支店 ☎(022)266-2341



M2404GD.A



新技術紹介 - タグの自己切断により、ワンステップで実現する 高純度な組換えタンパク質精製

Cytiva ディスカバリー事業部 モダリティスペシャリスト
奥山 知之

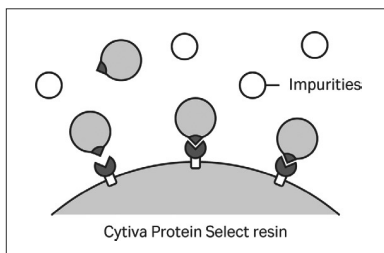
組み換えタンパク質の精製をより効率よく精製するためにタグは幅広く利用されています。Cytiva Protein Select™ resinは組換えタンパク質の精製用の新しいアフィニティークロマトグラフィーレジンです。Cytiva™ Protein Select™ tagを用いることでタグは自己切断されます。また切断後目的タンパク質にはタグのアミノ酸が残存せず、1ステップで高純度なタンパク質を溶出できます。この新しいアフィニティークロマトグラフィーテクノロジーについて、具体例を交えてご紹介します。

Cytiva Protein Select™ tag・resinの主な特長

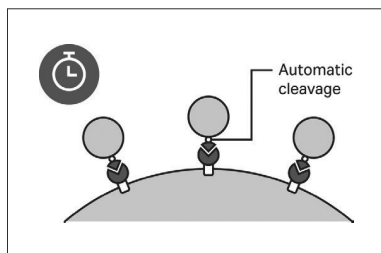
- ・高い特異性
- ・シンプルな精製プロトコール
- ・ワンステップで精製とタグ切断が可能
- ・タグのアミノ酸配列が目的タンパク質に残らない
- ・目的タンパク質にマイルドなプロトコール
- ・高い柔軟性



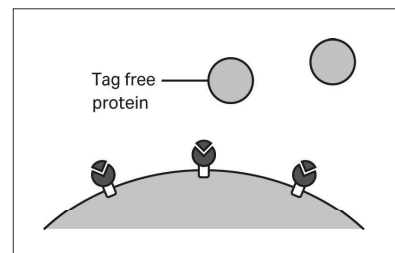
サンプル添加・洗浄



ホールド



溶出



Cytiva Protein Select™ tag

以下の URL から登録フォームにご登録いただくと、タグ配列が記載されたデータシートを入手できます



<https://info.cytivalifesciences.com/protein-select-research-jp.html>

Cytiva

グローバルライフサイエンステクノロジーズジャパン株式会社
〒169-0073 東京都新宿区百人町 3-25-1 サンケンビルディング
www.cytiva.com

Cytiva and the Drop logo are trademarks of Global Life Sciences IP Holdco LLC or an affiliate. Protein Select is a trademark of Global Life Sciences Solutions USA LLC or an affiliate doing business as Cytiva. © 2024 Cytiva. All goods and services are sold subject to the terms and conditions of sale of the supplying company operating within the Cytiva business. A copy of those terms and conditions is available on request. Contact your local Cytiva representative for the most current information. For local office contact information, visit cytiva.com/contact



第24回 日本蛋白質科学会年会 DKSH ランチョンセミナー

日時: 6月11日(火)12:00-12:50 会場: D会場(107)

複雑な分子間相互作用の理解に新たな角度で切り込むテクノロジー SwitchSENSE と RT-IC のご紹介 およびタンパク質物性評価向けの各種最新装置のご紹介

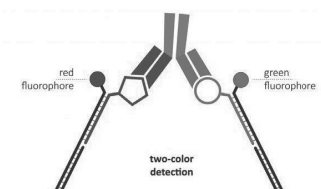
坂口 安史 (DKSH マーケットエクспанションサービスジャパン株式会社 科学機器部)

SwitchSENSE はドイツの Dynamic Biosensors 社による、新しいバイオチップテクノロジーです。DNA をアンカーとしてチップ上に分子を提示するこの手法は、その分子提示の柔軟性により、1対1の親和性(Affinity)のみに依存せず、複数結合によるアビディティ(Avidity)や協同性(Cooperativity)の寄与によって形成されるような多重特異性の分子相互作用の結合カインेटクスについて、個々の結合の Affinity と Avidity を明確に識別し、協同性の効果を詳細に解析することが可能になります。

一方で、RT-IC(Real Time Interaction Cytometry:リアルタイム相互作用サイトメトリー)は、従来の装置では困難であった、細胞表面上での相互作用をリアルタイムに直接的に測定することができる手法です。生物学的システムの複雑さを保持した状態での相互作用カインेटクス解析が可能です。



タンパク質-核酸
コンジュゲート精製装置



二重特異性抗体の結合の協同性
を、2つのシグナルで識別して解析



heliX+
(SwitchSENSE)

heliXcyto
(RT-IC)

この他、DKSH で取扱いのタンパク質物性研究やバイオ医薬品の製剤開発向けの各種装置をご紹介します。



ゲル撮影装置
・ケミルミメー
ジャー



フローイメージング
顕微鏡



ナノ粒子トラッキング解析



動的光散乱測定



微量粘度計

Market Expansion
Services by
www.dksh.com



DKSHマーケットエクспанションサービスジャパン株式会社
テクノロジー事業部門 科学機器部
〒108-8360 東京都港区三田3-4-19
Phone : 03-5730-7610 FAX : 03-5730-7605
tp.labtyo@dksh.com www.dksh.jp



An overview of current microscope and application developments in the field of cryo-FIB

Dr. Rigort Alexander

Product Marketing Manager, Thermo Fisher Scientific (英語講演)

Dr. Shintaro Maeda

Business Development Associate, Thermo Fisher Scientific (日本語講演)

クライオ電子顕微鏡の技術進歩は目覚ましく、2017年に単粒子構造解析法への貢献に対してノーベル賞が授与されてから数年で原子分解能へ到達したタンパク質構造が報告された。これにより、クライオ電子顕微鏡による単粒子構造解析がX線結晶構造解析やNMR法と並び高分解能構造解析用アプリケーションとして利用できることを明確に示した。また、単粒子構造解析は膜タンパク質等の難結晶性試料の構造を多数決定したのみならず、近年猛威を振るった新型コロナウイルスへのワクチン開発にも多大な貢献をした。このことからクライオ電子顕微鏡は製薬企業での新規創薬プラットフォームとして導入が進んでおり、弊社クライオ電子顕微鏡はグローバルスタンダードとして多くの研究者に利用されている。

そして、最新のアプリケーションであるクライオトモグラフィーはクライオFIB-SEMと併用して行われ、細胞内小器官の可視化だけでなく、細胞内に存在するタンパク質分子の高分解能構造解析をも実現する。つまり、細胞内のアクティブなタンパク質構造を見る究極の構造解析用アプリケーションである。本セミナーでは最新のFIB-SEMとクライオトモグラフィーの解析例をご紹介します。

thermofisher.com/HydraBio



お問合せ先:
サーモフィッシャーサイエンティフィック
日本エフイー・アイ株式会社営業部
〒140-0002 東京都品川区東品川4-12-2 品川シーサイドウエストタワー1F
Email: JPTOK.sales-jp@thermofisher.com | TEL 03-3740-0970

thermo scientific

The 24th Annual Meeting of the Protein Science Society of Japan

第24回日本蛋白質科学会年会

Refeyn Japanランチョンセミナー

日時: 2024年6月12日(水) 11:50 - 12:40

場所: B会場

基調講演 ●

ご講演者: 大阪大学大学院工学研究科生物工学専攻

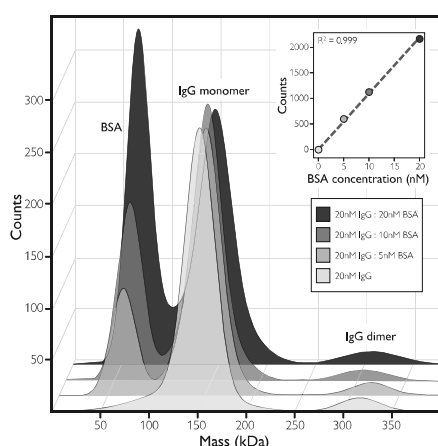
山口 祐希 先生

Mass photometry (MP) 法を用いた
アデノ随伴ウイルスベクターの特性解析

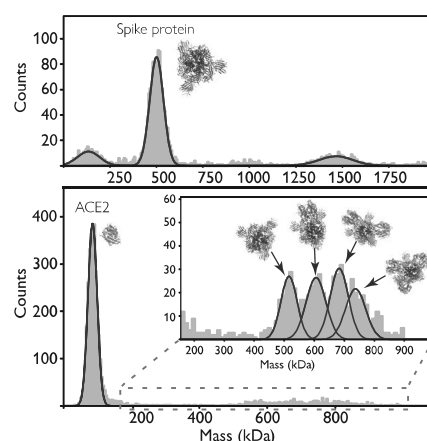
Mass photometry (MP) 法は、干渉散乱顕微鏡の原理を利用した測定方法で、サンプルがガラス表面に吸着した際に生じる散乱光を検出し、溶液中の蛋白質の分子量および分布を決定する手法である。MP法はサンプル量が少量かつラベルフリーで測定でき、幅広い溶媒条件で測定可能という特徴を持つ。

本講演では、MP法の特徴を活かしたアプリケーションとして、遺伝子治療用ウイルスベクターとして近年注目されている、アデノ随伴ウイルスベクターのゲノム放出機構に関する測定例を他の測定方法との比較を織り交ぜながら紹介する。

Mass Photometryを用いたアプリケーション事例



20 nM IgG存在下における、
BSAのタイトレーション結果



新型コロナウイルス(SARS-CoV2)スパイク蛋白質の分子量分布(上)と、ACE2との相互作用による複合体分布(下)

RE•FEYN[®]
WEIGHING MOLECULES WITH LIGHT

レフェイン・ジャパン株式会社
657-0036 神戸市灘区桜口町1-1-14
<https://www.refeyn.co.jp/>

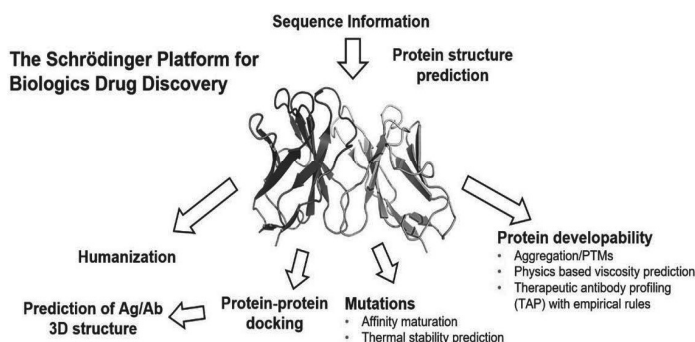
第24回蛋白質科学会年会 シュレーディンガー ランチョンセミナー

構造に基づいた抗体エンジニアリングの最前線: Epitope Mapping, Cryo-EMと*in silico*技術のインタープレイ

シュレーディンガー株式会社

Senior Principal Scientist 市原 収

シュレーディンガーの創薬プラットフォームは、物理学の第一原理に基づいた計算化学技術を駆使することで、タンパク質立体構造情報に基づく高度な薬物設計を可能とし、そのソフトウェアは、世界中の主要製薬企業で活用されています。本セミナーでは、シュレーディンガーのBiologics Modeling Suite: BioLuminateを用いた一般的な抗体の3Dモデリング技術に加えて、タンパクタンパク・ドッキングを用いた抗原抗体複合体構造の予測や、自由エネルギー摂動法(FEP)によるアフィニティ・安定性予測などについて解説します。



近年、FEP法は小分子創薬の領域において、Wetな実験系によるアッセイに先行して実施される高精度な*in silico*アッセイとして、創薬研究の効率化に大きなインパクトを与えています。同様に、抗体エンジニアリングの分野においても、抗原と抗体の複合体の構造が既知である場合、小分子の場合と遜色ない精度でのアフィニティ変化の予測、配列最適化が可能です。一方、実際の抗体医薬開発の現場では、開発中の抗体について抗原との複合体の構造が解かれていることはまれであり、*in silico*での複合体構造予測法の開発が強く求められています。最近我々は、拡張アンサンブル法を用いたMDシミュレーションと各種のエピトープマッピング実験データを活用した、抗原・抗体複合体構造推定法を開発しました。この手法を用いることにより、単独では特定の安定コンフォメーションを持たないDisorderedエピトープを有する抗原や20アミノ酸残基を超えるような長いCDR H3ループを持つ抗体と抗原の複合体構造の予測が可能となります。使用するエピトープマッピングのデータとしては、一般的なPeptide Array, Alanine Scan, Hydrogen-Deuterium Exchangeなどの手法の中でも、Chemical Cross-Linkingが特に有用であることが明らかとなりました。

本セミナーでは、これらのエピトープマッピング技術の有用性の比較に加えて、Negative Stain EMなど、15-20Å程度の低分解能のCryo-EMデータから原子レベルの解像度を持つ抗原・抗体複合体モデルを作成する方法についても紹介します。

お問い合わせは info-japan@schrodinger.com
詳細は www.schrodinger.com



Schrödinger

シュレーディンガー株式会社

Copyright © 2022 Schrödinger, Inc.

〒100-0005東京都千代田区丸の内1-8-1 丸の内トラストタワーN館13階
電話: 03-4520-7090



第24回日本蛋白質科学会

ブルカージャパン ランcheonセミナー

日時：2024年6月12日 (水) 11:50~12:40

会場：札幌コンベンションセンター D会場

質量分析装置によるタンパク質分析の実例と最新型SPRのご紹介

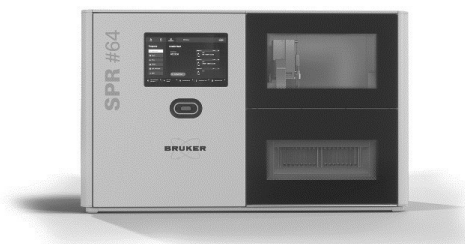
ブルカージャパン株式会社 大城 理志

質量分析は正確な分子量決定に基づく翻訳後修飾（酸化、脱アミド化、リン酸化、糖鎖付加等）の解析を中心に、タンパク質研究において欠かせない分析手法となっています。また、タンパク質単体のみではなく、複合体の分子量を決定することのできるNative MSはサブユニット構成比の決定や分子間相互作用解析において有用な方法です。

Brukerの質量分析装置では、高質量分解能型のQTOFとSNAPIIアルゴリズムに基づき、LC/MS分析におけるタンパク質のモノアイソトピック質量を正確な同位体パターンに沿って決定することが可能です。これにより、ペプチドマッピングをすることなく、翻訳後修飾（脱アミド化含む）に起因する質量変化を検出することが可能です。また、ペプチドマッピングによる翻訳後修飾部位の解析においては、QTOFの前段にイオントラップ型イオンモビリティ (Trapped-Ion Mobility Spectrometry: TIMS) デバイスを搭載したtimsTOFシリーズにより、イオンの衝突断面積 (CCS) に基づく新たな分離軸 (1/K0) を加え、より短いグラジエント時間で高シーケンスカバレッジのデータを取得することが可能です。

本セミナーでは弊社の質量分析装置の特徴を活かした、タンパク質分析の実例についてご紹介させていただきます。

さらに、分子間相互作用解析装置として、最新モデルであるSPR #64を発表しました。マイクロ流路を垂直方向と水平方向に切り替えることができる8x8のセンサースポット、流路洗浄の際にメンテナンスステップを必要としないDual Prism Sensor Chipなど独自の特徴を備えた、最新型SPRの使用例についてもご紹介させていただきます。

質量分析
詳細情報はこちらSPR
詳細情報はこちら

ブルカージャパン株式会社 ダルトニクス事業部

横浜営業所

〒221-0022横浜市神奈川区守屋町3-9

TEL: 045-440-0471 FAX: 045-453-1827

大阪営業所

〒532-0004大阪市淀川区西宮原1-8-29 2F

TEL: 06-6396-8211 FAX: 06-6396-1118

第24回日本蛋白質科学会年会ランチョンセミナー

2024年6月12日(水)11:50-12:40

E会場 (札幌コンベンションセンター 108)

創薬のためのCryptic Pocket自動同定機能について

OpenEye, Cadence Molecular Sciences

近田 千春

製薬業界では、常に新しい治療標的を探しています。シグナル伝達経路に見られる多くのタンパク質は、従来の医薬品開発に必要な作業の攻撃ポイントを特定できないため、歴史的に「創薬不可能」と考えられてきました。これらのタンパク質は、タンパク質表面が滑らかであったり、固有のタンパク質の動きが大きかったりするため、従来のバーチャルスクリーニング技術などで標的とすることができる明らかな「活性部位」を示しません。近年、MD (分子動力学) シミュレーションアルゴリズムとそれらを駆動する計算能力において多くの進歩が見られ、このような創薬不可能なタンパク質の動的挙動の研究が可能になりました。長い時間スケールのタンパク質運動は、多くの場合、リガンドが存在しないアポ型では通常は存在しませんが、シミュレーション中に開く可能性のあるポケットを明らかにすることができます。これらのいわゆる「Cryptic Pocket」は長年多くの研究者によって研究され、現在cryptic pocketに結合する最初の薬が市場に出ています。

弊社のWeighted Ensembleツールキット WESTPA [1] は、これらのゆっくりとした稀なポケット開口イベントを妥当な時間スケールで自動シミュレーションし、潜在的なcryptic pocketを特定することができます。WESTPAをOpenEyeのクラウドネイティブ・コンピューティング・プラットフォームであるOrion®に統合することで、このようなcryptic pocketを検出、分類するために必要な並列コンピューティングへのシームレスなアクセスとスケーラビリティを実現しました。GTPase KRASタンパク質を例に、創薬不可能と考えられていたタンパク質のcryptic pocketを特定する方法をご紹介します。

[1] Russo, John D., et al. "WESTPA 2.0: High-performance upgrades for weighted ensemble simulations and analysis of longer-timescale applications." *Journal of chemical theory and computation* 18.2 (2022): 638-649.

本セミナーにて紹介しますOrion®は、展示ブースにて実際にご覧いただけます。貴社の実際の研究にどのように役立てられるかについてもご相談を承りますので、ご遠慮なくお申しつけください。



OpenEye, Cadence Molecular Sciences
〒222-0033
神奈川県横浜市港北区新横浜2-100-45
日本ケイデンス・デザイン・システムズ社
045-475-7900



Learn more at www.cadence.com/openeye
Contact: oe_japan@eyesopen.com



日本電子株式会社 ランcheonセミナー

CRYO ARM™カートリッジを用いたクライオ FIB/TEM ワークフローの御紹介

Introduction of cryo FIB/TEM workflow with CRYO ARM™ cartridge

細木 直樹 (日本電子株式会社 ソリューション開発センター 副主査)

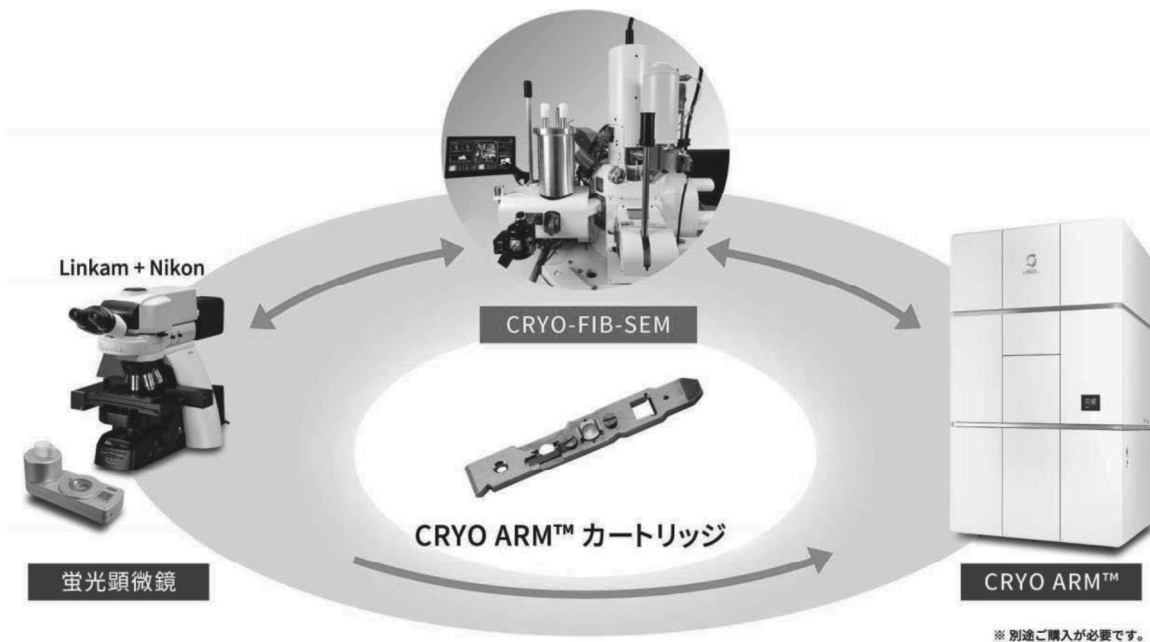
クライオ透過電子顕微鏡(TEM)法とは、急速凍結した生体試料を極低温下で溶液中の分子形態のまま観察することができる手法です。また、単粒子解析法やトモグラフィといった3次元再構成法と組み合わせることにより、蛋白質のような生体高分子の構造を高い分解能で解析することができます。

近年、細胞や組織等の電子線が透過しない厚さの凍結試料内における細胞小器官や生体高分子の構造を観察したいという要求が増えてきており、そのための薄片試料を作製する手段として、冷却状態で加工できるクライオ FIB 法が急速に発展してきています。

クライオ FIB およびクライオ TEM (クライオ FIB/TEM) を用いたワークフローにおいては、その工程全体を通して試料の良好な凍結状態を維持する必要があります。通常の TEM グリッドを用いた装置横断的な試料搬送の際には、試料損傷、紛失、霜の付着といったリスクが常につきまとうため、簡便で歩留まりの高いワークフローが求められます。

今回我々は、共通のカートリッジを用いて蛍光顕微鏡、クライオ FIB、クライオ TEM 間の試料搬送を行うことができるシステムを開発しましたので御紹介させていただきます。直径 3 mm の TEM グリッドではなく、ハンドリングの容易なカートリッジを用いてワークフローのほぼ全ての工程での試料搬送を行えるため、作業性および成功率が格段に向上しました。

また、本ワークフローをより簡単に行うため、またより成功率を向上させるため、我々は新たなクライオ FIB を開発しました。この装置の代表的な特徴は、カートリッジ搬送用クライオトランスファーホルダー、Pt コーターを備えたサブチャンバー、独自の鏡筒内アンチコンタミネーターを構成していることです。これによって試料の搬送回数を減らし、搬送時、加工時の試料汚染リスクをさらに低減できるようになりました。また回転可能かつ安定性に優れた熱伝導冷却方式の冷却ステージにより、クライオリフトアウトでの試料作製を高い成功率で実現できるようにもなりました。



CRYO ARM™ カートリッジを用いたクライオ FIB/TEM ワークフローの概念図

日本電子株式会社 www.jeol.co.jp 科学・計測機器営業本部 TEL 03-6262-3567
〒100-0004 東京都千代田区大手町 2-1-1 大手町野村ビル 13 階

Charge Detection Mass Spectrometry (CD-MS) によるアデノ随伴ウイルスベクターの質量分布解析

大阪大学工学研究科生物工学専攻 自然科学研究機構 ExCELLS、(株) ユー・メディコ

内山 進

アデノ随伴ウイルス(AAV)ベクターは分子量が5MDa、粒子直径が25nmの遺伝子治療の有望なプラットフォームモダリティであり、米国や欧州で開発された製品が承認され、治療法が無かった難病の治療が実現しつつある。また、米国を中心に研究開発が盛んに実施されており、現在約250の臨床試験が行われている。AAVベクターは組換え技術とヒト細胞を利用して製造されるが、医薬品として利用するためには、有効性や安全性に関係する物理化学的、生化学的、さらには生物学的特性の観点から品質分析を行い、患者への投与時のリスクを把握する必要がある。日本では2018年度から2023年度にかけてAAVベクターの製造技術開発プロジェクトが本格的に行われ、演者は品質分析法開発を主に担当した。その成果、2024年現在、AAVベクターの品質は網羅的に分析可能となり、さらに高品質AAVベクターの国内製造も実現したことから、国内臨床試験に向けた取り組みを進めている。本講演では、AAVベクターで必要となる分析項目および適切な分析法を紹介の上、一次構造、翻訳後修飾、高次構造解析、定量的分散度解析、さらにそれぞれの特性と生物活性の関係について、実例を示しながら説明する。特に、Waters社との共同研究により実現したCD-MSによるAAVカプシドの質量分布解析はAAVベクターの特性解析においては重要な役割を果たしたといえる。蛋白質巨大複合体の質量分析の今後の方向性についても述べる予定である。

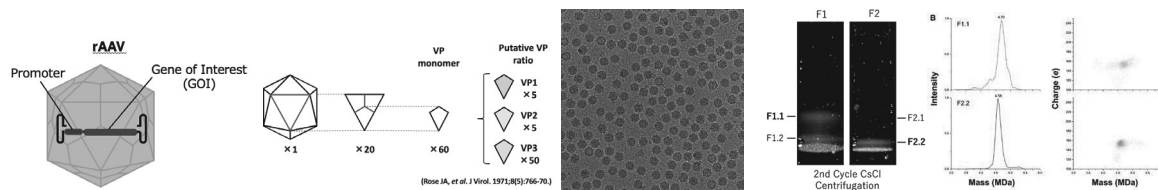


図1 3種類のウイルス蛋白質、VP1、VP2、およびVP3、が約5:5:50の比で60量体となり正二十面体のAAVカプシドを構成し、カプシドの中に最長で約5kbの一本鎖DNAが内包されている。AAVベクターの密度勾配遠心の結果、密度が異なる2種類の完全粒子が存在することが判明し、分画した2種類の完全粒子のCD-MSによりVP構成比の違いが原因であることが明らかとなった(文献4より)。

【参考文献】

- 1) Yamaguchi et al., Glycosylation of recombinant adeno-associated virus serotype 6. *Mol. Ther. Meth. Clin Dev.* in press (2024).
- 2) Ikeda et al., Higher-Order Structure of an Adeno-Associated Virus Serotype 8 by Hydrogen/Deuterium Exchange Mass Spectrometry. *Viruses* 6: 585 (2024).
- 3) Nishiumi et al., Combined 100 keV cryo-electron microscopy and image analysis methods to characterize the wider adeno-associated viral products. *J Pharm Sci.* in press (2024).
- 4) Hirohata et al., Applications and Limitations of Equilibrium Density Gradient Analytical Ultracentrifugation for the Quantitative Characterization of Adeno-Associated Virus Vectors. *Anal. Chem.* 96(2):642-651 (2024).
- 5) Ohnishi et al., Enhancement of recombinant adeno-associated virus activity by improved stoichiometry and homogeneity of capsid protein assembly. *Mol. Ther. Meth. Clin Dev.* 31:101142 (2023).
- 6) Kurinamaru T et al., Optimization of Flow Imaging Microscopy Setting Using Spherical Beads with Optical Properties Similar to Those of Biopharmaceuticals. *J Pharm Sci.* 112(12):3248-3255 (2023).
- 7) Maruno T, et al. Size Distribution Analysis of the Adeno-Associated Virus Vector by the c(s) Analysis of Band Sedimentation Analytical Ultracentrifugation with Multiwavelength Detection. *J Pharm Sci* 112(4):937-946 (2023).
- 8) Takeda K, et al., Critical Calibration of Mass Photometry for Higher-Mass Samples Such as Adeno-Associated Virus Vectors. *J Pharm Sci.* 112(4):1145-1150 (2023).
- 9) Salama R, et al., Reduction of Recombinant Adeno-Associated Virus Vector Adsorption on Solid Surfaces by Polyionic Hydrophilic Complex Coating. *J Pharm Sci.* 111(3):663-671 (2022).
- 10) Oyama H, et al., Characterization of Adeno-Associated Virus Capsid Proteins with Two Types of VP3-Related Components by Capillary Gel Electrophoresis and Mass Spectrometry. *Hum. Gene Ther.* 32, 1403-1416 (2021).
- 11) Maruno T, et al., Comprehensive Size Distribution and Composition Analysis of Adeno-Associated Virus Vector by Multiwavelength Sedimentation Velocity Analytical Ultracentrifugation. *J. Pharm. Sci.* 110, 3375-3384 (2021).

Waters™

日本ウォーターズ株式会社 www.waters.com

東京本社 〒140-0001 東京都品川区北品川1-3-12 第5小池ビル TEL 03-3471-7191

大阪支社 〒532-0011 大阪市淀川区西中島5-14-10 新大阪トヨタビル11F TEL 06-6304-8888

お問い合わせ

www.waters.com/ContactUs





第24回日本蛋白質科学会年会ランチョンセミナー

2024年6月13日(木)

11:15-12:05 E会場(札幌コンベンションセンター 108)

1. PDBjの最近の活動とwwPDBの今後の活動方針について Activity report of PDBj and activity plan of wwPDB

栗栖源嗣 (大阪大学蛋白質研究所)

Genji Kurisu, Institute for Protein Research,
Osaka University

PDBj (<https://pdbj.org>) は、worldwide PDB(<https://wwpdb.org>)の設立メンバーとしてアジア・中東地区で決定された蛋白質等の生体高分子の構造をwwPDBが管理するコアアーカイブ(PDB, BMRB, EMDB)に登録処理し、国際的に協調して座標と実験データを全世界へ無償で公開しています。今回のセミナーでは、PDBjの最近の活動を報告するとともに、wwPDBが管理するコアアーカイブの今後の運営体制とデータ検証の方向性について、更にSAXSやSANZ, MX-MSなどとAlphaFoldを組み合わせたIntegrated/Hybrid法により構造決定したエントリーのPDB-Devへの登録について説明します。さらに2023年wwPDB運営諮問委員会で議論された今後の活用の方向性を含めて、PDB周辺の最近の状況を紹介します。

2. PDB-Devへのデータ登録について

Introduction to Data deposition in PDB-Dev

于健 (大阪大学蛋白質研究所)

Jian Yu, Institute for Protein Research,
Osaka University

OPDB-Dev (<https://pdb-dev.wwpdb.org>) は統合/ハイブリッド (I/H) モデリングによって得られた構造モデルおよびその基となる実験データのアーカイブシステムのプロトタイプです。近年、実験と計算を相補的に組み合わせて生体高分子の集合体構造を解析するI/H法が発展してきました。この手法では、X線結晶構造解析、NMR分光法、電子顕微鏡といった従来の手法によって決定された構造情報に加え、小角散乱(SAS)、原子間力顕微鏡 (AFM)、電子スピン共鳴 (EPR)、質量分析法(MS)などの手法およびさまざまなプロテオミクスやバイオインフォマティクスによって得られた情報による空間的制約と、計算による解析結果を組み合わせることにより、生体高分子の超分子複合体構造を決定します。PDB-Devはこうした構造モデルと実験データを統合的に保持するために開発されました。今回のセミナーではPDB-Devへのデータ登録について説明します。

Protein Data Bank Japan
<https://pdbj.org>

日本蛋白質構造データバンク (PDBj) 事務局
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2
大阪大学蛋白質研究所 蛋白質構造データバンク構築研究室
TEL: 06-6879-4311 (事務局) 8634 (登録事務局)

若手育成・男女共同参画合同ワークショップ

日 時：6月13日（木）年会3日目 11:15-12:05

会 場：D会場（札幌コンベンションセンター 107）

世話人：若手育成・男女共同参画理事、男女共同参画ワーキンググループ

司 会：村田武士（千葉大）

セッションテーマ：若者（特に女性）が博士号を取得したくなるセミナー

過去20年にわたり、日本の博士号取得者数が顕著に減少しました。特に、女性の博士号取得者は全体の約20%に留まり、この数字は日本の高等教育や研究分野におけるジェンダー不均衡の深刻さを示しています。この現状を踏まえ、若者（特に女性）が高等教育へ進むことの価値と魅力を再発見する機会を提供します。このセミナーでは、博士号が開く多様なキャリアパスと、それに伴う個人の成長と社会貢献の可能性に焦点を当てます。

本ワークショップでは、以下のお二人から話題提供いただきます。講演後には、参加者からの質問に答える時間を設け、内容に関する質疑応答と総合討論を行います。学部生、大学院生、若手研究者の今後のキャリア形成に役立つ内容ですので、ぜひご参加ください。また、研究グループのPI（主任研究者）にもご参加いただき、アドバイスをいただければ幸いです。

話題提供1（15分）：「博士人材として社会で活躍してみませんか」

正本法雄（国立研究開発法人科学技術振興機構 助成事業推進部）

近年、産学官から博士人材に対して、主に国際競争力の視点でイノベーション創出や産業競争力強化への大きな貢献が期待されています。これに伴い、博士号取得者を増やすための施策やキャリアパスの拡大を目指す施策などが実施されています。本講演ではJSTで実施している次世代研究者挑戦的研究プログラム（SPRING）を含む博士人材の育成・支援施策と博士人材のキャリアなどについて話題提供いたします。

話題提供2（15分）：「研究職からCGイラストレーターへ」

澄田裕美（京都大学 医生物学研究所）

博士号取得後、民間企業における研究職を経て、現在は「蛋白質を扱うCGイラストレーター」という日本では珍しい仕事に従事している。本講演では、自身のキャリアパスや現在の研究支援業務の紹介と、実体験に基づいた博士号取得のメリットを紹介する。

質疑応答・総合討論（話題提供の後、質疑応答、総合討論を行います。）