

分子機械改造

Redesign of molecular machines

蛋白質構造予測や新規蛋白質構造設計が新しいステージに移行したが、触媒反応と共役して大規模な構造変化をする分子機械の機能予測や設計は未だ極めて困難である。そのような中でも、近年特筆すべき成果が報告されている。本ワークショップでは、独創的なアイデアで分子機械の改造・再設計に成功している例を取り上げる。加えて、今後の合理的設計の可能性について議論したい。

While the structure prediction and the de novo design of proteins have entered a new era, the design of molecular machines that undergo large-scale conformational changes still remains highly challenging. Despite these difficulties, recent years have witnessed remarkable achievements in this area. This workshop will highlight groundbreaking successes in the redesign of molecular machines and provide a platform to discuss the future potential for rational design in this field.

オーガナイザー：野地 博行（東京大学）、飯野 亮太（分子科学研究所）

Organizers: Hiroyuki Noji (UTokyo), Ryota Iino (Institute for Molecular Science)

WS1-1 [9:15] エンジニアリング的アプローチによって明らかになった FoF1-ATP 合成酵素の設計原理 Design principles of FoF1-ATP synthase elucidated by an engineering approach

○上野 博史 (Hiroshi Ueno)

東大・院工・応化 (Dept. of Appl. Chem., Sch. of Eng., The Univ. of Tokyo)

WS1-2 [9:35] ハイブリッド MC/MD 計算法を用いた F 型合成酵素の合成機能向上を目指した合理デザイン Improving the synthetic function of F-Type ATP synthase through hybrid MC/MD simulations

○久保 進太郎 (Shintaro Kubo)、野地 博行 (Hiroyuki Noji)

東大・工・応化 (Dept. of Applied. Chem., The Univ. of Tokyo)

WS1-3 [9:55] Unfoldase-driven nanopore translocation of single protein strands for sequence, structural, and post-translational modification analysis

○元根 啓佑 (Keisuke Motone)

阪大・工 (Grad Sch. of Eng., Osaka Univ.)

WS1-4 [10:15] ダイナミクスを考慮したタンパク質の構造予測と理論的設計への挑戦 Challenges in structure prediction and rational design of proteins considering dynamics

○季高 駿士¹ (Shunji Suetaka)、大岡 紘治² (Koji Ooka)、吉村 匡隆¹ (Masataka Yoshimura)、
新井 宗仁^{1,2,3} (Munehito Arai)

¹ 東大・総合文化・生命環境 (Dept. Life Sci., The Univ. of Tokyo)、² 東大・教養 (Col. Arts & Sci., The Univ. of Tokyo)、

³ 東大・理・物理 (Dept. of Phys., The Univ. of Tokyo)

WS1-5 [10:35] 人エテザーを導入したキネシンモータードメインの運動解析による基幹的な運動機構の研究 Tether-scanning the kinesin motor domain reveals a core mechanical action

○住吉 里英子 (Rieko Sumiyoshi)、山岸 雅彦 (Masahiko Yamagishi)、矢島 潤一郎 (Junichiro Yajima)

東大・総合文化 (Grad. Arts & Sci., The Univ. of Tokyo)

- WS1-6** [10:55] **リニア型生物分子モーターを改造して制御可能な輸送システムを再デザインする**
Redesigning Controllable Transport Systems by Engineering Linear Biomolecular Motors
 ○古田 健也 (Ken'ya Furuta)
 情報通研・未来 ICT・バイオ (BioICT, Adv. ICT, NICT)
- WS1-7** [11:15] **DNA 人工分子モーターの性能向上に向けた合理的改造戦略**
Rational engineering for high-performance DNA artificial molecular motor
 ○原島 崇徳^{1,2} (Takanori Harashima)、大友 章裕^{1,2} (Akihiro Otomo)、飯野 亮太^{1,2} (Ryota Iino)
¹ 分子科学研究所 (Institute for Molecular Science)、² 総合研究大学院大学 (SOKENDAI)
- [11:35] **総合討論**
Discussion

WS2 C 会場 (407) / Room C (407)
 6 月 18 日 (水) / June 18 (Wed) 9:15 ~ 11:45

Japanese Session

フォールドしていない構造が重要！ Unfolded structures are key!

AlphaFold にノーベル賞が授けられたが、「折れたたまれていない unstructured な領域」こそ、タンパク質の機能を理解するには重要である。核内のタンパク質は半分近くがそのような Unstructured タンパク質であり、しかし、それらが主にがんの原因となっていることはゲノムワイドな解析などで確かなものとなっている。抗体も届かないこの核内のタンパク質の解析に挑む最先端の研究を議論する。

The Nobel Prize was awarded to AlphaFold, but it is the "unfolded, unstructured regions" that are important for understanding protein function. Genome-wide analyses have confirmed that nearly half of the proteins in the nucleus are such unstructured proteins, but that they are mainly responsible for cancer. We will discuss the state-of-the-art research on the analysis of these proteins in the nucleus, which even antibodies cannot reach.

オーガナイザー：岩崎 憲治 (筑波大学)、廣明 秀一 (名古屋大学)
 Organizers : Kenji Iwasaki (Univ. of Tsukuba), Hidekazu Hiroaki (Nagoya Univ.)

- [9:15] **はじめに**
Opening Remarks
 ○岩崎 憲治¹ (Kenji Iwasaki)、廣明 秀一² (Hidekazu Hiroaki)
¹ 筑波大学 (University of Tsukuba)、² 名古屋大学 (Nagoya University)

- WS2-1** [9:20] **結核菌 MDP1 の C 末端天然変性領域の NMR 解析**
NMR analysis of the C-terminal intrinsically disordered region of Mycobacterial DNA-binding protein 1(MDP1)
 ○浅井 彩花¹ (Ayaka Asai)、合田 名都子¹ (Natsuko Goda)、天野 剛志^{1,2} (Takeshi Tenno)、
 日比野 絵美¹ (Emi Hibino)、西山 晃史³ (Akihito Nishiyama)、伊東 孝祐⁴ (Kosuke Ito)、
 松本 壮吉⁴ (Sohkichi Matsumoto)、廣明 秀一^{1,2,5} (Hidekazu Hiroaki)
¹ 名大・院・創薬 (Grad. School of Pharm. Sci., Nagoya Univ.)、² 合同会社 BeCellBar (BeCellBar)、
³ 新潟大・院・医歯学総合研 (Grad. School of Med and Dent Sci., Niigata Univ.)、
⁴ 新潟大・院・自然科学研 (Grad. School of Sci and Tech., Niigata Univ.)、⁵ COMIT

WS2-2 [9:40] **SSX1 と SSX2 は核内において液滴様集合体を形成する****SSX1 and SSX2 form droplet-like aggregates in the nucleus**

○蟠原 望来¹ (Mikuru Ebihara)、吉尾 隆稀¹ (Ryuki Yoshio)、韓 叡佳¹ (Eika Kan)、
加藤 かざし² (Kazashi Kato)、大徳 浩照² (Hiroaki Daitoku)、加香 孝一郎³ (Koichiro Kako)、
宮ノ入 洋平⁴ (Yohei Miyanoiri)、深水 昭吉² (Akiyoshi Fukamizu)、岩崎 憲治^{2,5} (Kenji Iwasaki)

¹ 筑波大院・数理物質 (Grad. Sch. Pure. App. Sci., Univ. of Tsukuba)、² 筑波大・TARA (TARA, Univ. of Tsukuba)、
³ 筑波大・生命環境 (ILES, Univ. of Tsukuba)、⁴ 大阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.)、
⁵ 筑波大・QiLS (QiLS, Univ. of Tsukuba)

WS2-3 [10:00] **天然変性領域予測プログラムと AlphaFold****Predicting Intrinsically Disordered Regions and Functional Sites: From IDR Predictors to AlphaFold**

○安保 勲人¹ (Hiroto Anbo)、清水 樹¹ (Itsuki Shimizu)、佐久間 航也^{3,4} (Koya Sakuma)、
太田 元規² (Motonori Ota)、福地 佐斗志¹ (Satoshi Fukuchi)

¹ 前工大・工 (Fac. of Eng., Maebashi Inst. of Tec.)、² 名大・情報 (Grad. Sch. Informatics, Nagoya Univ.)、
³ 名大・細胞生理 (CeSPI, Nagoya Univ.)、⁴ 名大・創薬 (Grad. Sch. Pharm. Sci., Nagoya Univ.)

WS2-4 [10:35] **タンパク質液滴を測り、操り、創る****Watching, manipulating, and creating protein droplets**

○鎌形 清人 (Kiyoto Kamagata)

岐阜大・工・化学生命工 (Fac. of Eng. & Grad. Sch. of Eng., Gifu Univ.)

WS2-5 [11:10] **天然変性タンパク質の迅速微量構造解析を実現する無細胞タンパク質結晶化反応****Cell-free Protein Crystallization for Rapid Structure Determination of Intrinsically Disordered Proteins**

○上野 隆史 (Takafumi Ueno)

科学大・生命理工 (Sch. Life Sci. Tech., Science Tokyo)

WS3

D 会場 (408) / Room D (408)

6 月 18 日 (水) / June 18 (Wed) 9:15 ~ 11:45

Japanese Session

リン脂質膜を支配するタンパク質科学のアンサンブル**Ensemble of Protein Science on the Phospholipid Bilayer**

リン脂質は、自己集合することで「リン脂質二重層」と呼ばれる高次構造を形成し、細胞やオルガネラを形作る。リン脂質二重層は、リン脂質のフリップ/スクランブル・トランスポートによる分布制御や膜自身の分解によって、その品質が管理されている。本セッションでは、リン脂質の分布制御や膜ダイナミクスを司るタンパク質に着目して精力的に研究を進めている研究者の最新の知見を紹介し、リン脂質二重層を支配する様々なタンパク質のメカニズムについて議論したい。

Phospholipids self-assemble to form a higher-order structure called the “phospholipid bilayer”, which constitutes cells and organelles. The quality of the phospholipid bilayer is maintained through the regulation of phospholipid distribution by flip/scramble and transport, and the degradation of the membrane itself. In this session, we aim to present the latest findings from researchers who are actively studying proteins involved in the regulation of phospholipid distribution and membrane dynamics. We will discuss the mechanisms of various proteins that govern the phospholipid bilayer.

オーガナイザー：竹田 弘法 (神戸大学)、渡邊 康紀 (山形大学)

Organizers : Hironori Takeda (Kobe Univ.), Yasunori Watanabe (Yamagata Univ.)

[9:15] はじめに**Opening Remarks**

○竹田 弘法 (Hironori Takeda)

神戸大学 (Kobe Univ.)

- WS3-1** [9:18] **細胞膜の非対称性：その維持と崩壊**
Regulation of phospholipid distribution in the lipid bilayer by flippases and scramblases
 ○長田 重一 (Shigekazu Nagata)
 阪大・免フロ・生化 (Biochem, iFREC, Osaka Univ.)
- WS3-2** [9:48] **低酸素環境におけるミトコンドリア品質管理の制御**
Regulation of mitochondrial quality control in hypoxic environments
 ○赤羽 しおり^{1,2,3} (Shiori Akabane)、遠藤 斗志也² (Toshiya Endo)、岡 敏彦³ (Toshihiko Oka)
¹ 神奈川県立がんセンター臨床研・がん生物 (Cancer Biol. Div., Kanagawa Cancer Center Res. Inst.),
² 京産大・生命科学 (Fac. of Life Sci., Kyoto Sangyo Univ.),
³ 立教大・理・生命理学 (Dept. of Life Sci., Fac. of Sci., Rikkyo Univ.)
- WS3-3** [10:13] **Sfh4 によるオルガネラ膜間リン脂質輸送機構の構造基盤**
Structural basis for Sfh4-mediated phospholipid transport between organelle membranes
 ○渡邊 康紀 (Yasunori Watanabe)
 山形大・理 (Fac. of Sci., Yamagata Univ.)
- WS3-4** [10:33] **細胞膜脂質フリッパーゼ ATP11C の構造生理学**
Structural physiology of plasma membrane flippase ATP11C
 ○阿部 一啓 (Kazuhiro Abe)
 北大・理・化学 (Grad Sch Sci., Hokkaido Univ.)
- WS3-5** [10:58] **ミトコンドリア膜間腔タンパク質 Atg44 はマイトファジーに必要なミトコンドリア分裂を媒介する**
The mitochondrial intermembrane space protein Atg44 mediates fission required for mitophagy
 ○丸山 達朗 (Tatsuro Maruyama)
 微化研 (IMC)
- WS3-6** [11:23] **新規βバレル型リン脂質スクランブラーゼ Mitochondrial PORIN 複合体の cryo-EM 構造と機能**
Structural and functional study of the mitochondrial β-barrel type lipid scramblase PORIN complex
 ○竹田 弘法 (Hironori Takeda)
 神戸大学 (Kobe Univ.)
- [11:43] **おわりに**
Closing Remarks
 ○渡邊 康紀 (Yasunori Watanabe)
 山形大学 (Yamagata Univ.)

クロススケール計測が明らかにする生体分子複合体の動的構造と生命機能 Dynamic structure and biological function of biomolecular complexes revealed by cross-scale measurements

共催：学術変革領域研究 A「クロススケール新生物学」

分子・タンパク質レベルからオルガネラ・細胞レベルまでの定量的クロススケール計測、特に細胞内で 20 ~ 500 nm 程度の大きさの「メゾ複合体」の構造および動態の計測は、生命現象の作用機序や病気の発症原因を理解するために重要です。様々な計測・解析技術の開発と計算科学も含めた融合により細胞生物学の新しいフレームワークを創出することができます。本セッションでは細胞質・生体膜・核などにおける様々な「メゾ複合体」に関する最先端の研究を議論します。

Quantitative cross-scale measurements from the molecular and protein levels to the organelle and cellular levels, and in particular, structure and dynamics analyses of “meso-complexes” of around 20 to 500 nm in size within cells are important for understanding the mechanisms of action of biological phenomena and the causes of disease. The development of various measurement and analysis techniques, as well as their integration with computational science, can create a new framework for cell biology. In this session, we will discuss the latest research on various “meso-complexes” working in the cytoplasm, biomembranes, and nucleus.

オーガナイザー：稲葉 謙次 (九州大学)、杉田 有治 (理化学研究所)

Organizers: Kenji Inaba (Kyushu Univ.), Yuji Sugita (RIKEN)

WS4-1 [16:00] クロススケール計測で解き明かす微小管ネットワーク形成の分子構造動態 Unraveling the Molecular Structural Dynamics of Microtubule Network Formation through Cross-Scale Measurements

○仁田 亮 (Ryo Nitta)

神大・医・生体構造解剖学 (Div. Struct. Med., Kobe Univ.)

WS4-2 [16:25] 細胞集団移動におけるメゾ構造体アクチンリングの組織化とその意義 Revealing the mechanism of dynamic mesoscale actin ring organization in collective cell migration

関根 清薫¹ (Sayaka Sekine)、中里 楓² (Kaede Nakasato)、佐藤 繭子³ (Mayuko Sato)、
豊岡 公徳³ (Kiminori Toyooka)、上地 浩之⁴ (Hiroyuki Uechi)、○倉永 英里奈^{2,4} (Erina Kuranaga)

¹ 科学大・総 (Inst. Integ. Res., Science Tokyo)、² 東北大・生命 (Grad. Sch. of Life Sci., Tohoku Univ.)、

³ 理研・環境資源 (RIKEN, CSRS)、⁴ 京大・薬 (Grad. Sch. Pharm. Sci., Kyoto Univ.)

WS4-3 [16:50] 核酸の膜輸送機構の解明 Nucleic acids transport through biological membranes

○濡木 理¹ (Osamu Nureki)、高井 啓^{1,2} (Akira Takai)、熊崎 薫¹ (Kaoru Kumazaki)、
岡田 康志^{1,2} (Yasushi Okada)

¹ 東大・理・生科 (Biol. Sci., Grad. Sci., The Univ. of Tokyo)、² 東大・医 (Grad. Med., The Univ. of Tokyo)

WS4-4 [17:15] 脂質膜との相互作用により誘起される蛋白質複合体の構造変化に対する分子動力学解析 Molecular Dynamics Analysis of Structural Changes in Protein Complexes Induced by Interactions with Lipid Membranes

○笠原 健人 (Kento Kasahara)

阪大院基礎工 (Grad. Sch. of Eng. Sci., The Univ. of Osaka)

WS4-5 [17:40] **Folding genomes at nucleosome resolution: Multiscale modeling and merging physicochemical potentials with machine learning approaches**
 ○ Tamar Schlick、Stephanie Portillo、Zilong Li、Sangram Kadam
 Department of Chemistry and Courant Institute of Mathematical Sciences Simons Center for Computational Physical Chemistry New York University

WS4-6 [18:05] **クライオ電子顕微鏡解析によるプリオン株表現型の構造的基盤の解明**
Cryo-EM analysis of distinct yeast prion fibrils reveals a structural basis of prion strain phenotypes
 ○ 田中 元雅 (Motomasa Tanaka)、野村 高志 (Takashi Nomura)
 理研・脳セ (RIKEN CBS)

WS5 B 会場 (中ホール) / Room B (Mid-sized Hall)
 6 月 18 日 (水) / June 18 (Wed) 16:00 ~ 18:30

Japanese Session

動的溶液環境におけるタンパク質自己凝縮： 革新技術による新たな生命科学のパラダイムシフト

Protein Self-Condensation in Dynamic Solution Environments: A New Paradigm Shift in Life Science through Innovative Technology

近年、生命活動の基盤である生体内溶液環境の変動が、タンパク質の液-液相分離やアミロイド線維化といった自己凝縮を引き起こし、神経変性疾患に関与することが明らかとなってきた。このよう現象の解明には原子から細胞レベルまでの各レベルで革新的手法の開発が不可欠である。本ワークショップでは、新たに開発した手法が切り拓く動的溶液環境の世界を探索し、生命科学の新たなパラダイムシフトについて議論する。

Fluctuations in solution environments, fundamental to biological activity, have been identified as key drivers of processes like protein phase separation and amyloid fibrillation, which are implicated in neurodegenerative diseases. This workshop will highlight innovative methods, from atomic to cellular levels, to analyze these dynamic solution behaviors and explore their implications, fostering a paradigm shift in life sciences.

オーガナイザー：菅瀬 謙治 (京都大学)、関山 直孝 (京都大学)
 Organizers : Kenji Sugase (Kyoto Univ.), Naotaka Sekiyama (Kyoto Univ.)

WS5-1 [16:00] **Rheo-NMR を用いた EGCG 酸化物による α -シヌクレインのアミロイド線維化抑制機構の解析**
Elucidation of the inhibitory mechanism of α -synuclein amyloid fibrillation by oxidized EGCG using Rheo-NMR

○ 菅瀬 謙治¹ (Kenji Sugase)、山口 黎士¹ (Reiji Yamaguchi)、袁 佐銘¹ (Cho Ming Yuen)、
 内田 啓太² (Keita Uchida)、森本 大智² (Daichi Morimoto)、宗 正智¹ (Masatomo So)、
 古川 垂矢子¹ (Ayako Furukawa)

¹ 京大・農・応生 (Div. Appl. Life Sci., Grad. Sch. Ag., Kyoto Univ.)、

² 京大・工・分子工 (Dep. Mol. Eng., Grad. Sch. Eng., Kyoto Univ.)

WS5-2 [16:25] **生体分子の溶媒和のための液体の積分方程式の開発と応用**
Development of integral equation theories for biomolecular solvation and those application

○ 吉田 紀生¹ (Norio Yoshida)、金丸 恒大^{1,2} (Kodai Kanemaru)、松井 優成¹ (Yusei Matsui)、
 山口 毅³ (Tsuyoshi Yamaguchi)、丸山 豊⁴ (Yutaka Maruyama)、森 俊文⁵ (Toshifumi Mori)

¹ 名大院情 (Grad. Sch. of Info, Nagoya Univ.)、² 京大福井セ (Fukui Inst., Kyoto Univ.)、

³ 名大院工 (Grad. Sch. Eng., Nagoya Univ.)、⁴ 阪大院基礎工 (Grad. Sch. Eng. Sci., Osaka Univ.)、

⁵ 九大院総理工 (Interdisciplinary Grad. Sch. Eng. Sci., Kyushu Univ.)

WS5-3 [16:50] **光技術を駆使したタンパク質自己凝縮のダイナミクス計測**
Exploring dynamics of protein self-condensation using novel laser spectroscopies

○ 中曾根 祐介 (Yusuke Nakasone)

京大・理・化学 (Dept. of Chem., Grad Sch. of Sci., Kyoto Univ.)

WS5-4 [17:15] **細胞内タンパク質導入を目指した新規光開裂分子ツールの開発**
Novel photocleavable molecules for intracellular protein delivery○猪瀬 朋子^{1,2,3} (Tomoko Inose)¹ 京大・白眉センター (The Hakubi center, Kyoto Univ.), ² 京大・iCeMS(iCeMS, Kyoto Univ.),
³ JST さきがけ (JST PRESTO)**WS5-5** [17:40] **Open Microfluidics：動的溶液環境下でのタンパク質凝縮現象の解明に向けた液滴操作技術**
Open Microfluidics: Droplet Manipulation for Understanding Protein Condensation Phenomena in Dynamic Solution Environments

○永井 萌土 (Moeto Nagai)

豊橋技科大 (Toyohashi Tech)

WS5-6 [18:05] **天然変性タンパク質の自己集合機構における局所構造バイアスの役割**
Conformational biases in local dynamics govern self-assembly mechanisms of intrinsically disordered proteins○関山 直孝¹ (Naotaka Sekiyama)、小林 凌河¹ (Ryoga Kobayashi)、吉田 紀生² (Norio Yoshida)、
中村 秀樹^{3,4} (Hideki Nakamura)、宮ノ入 洋平⁵ (Yohei Miyanoiri)、朽尾 豪人¹ (Hidehito Tochio)、
児玉 高志⁵ (Takashi Kodama)¹ 京大・理・生物物理 (Dept. of Biophysics, Grad Sch. of Science, Kyoto Univ.),² 名大・情報・複雑系科学 (Dept. of Complex Systems Science, Grad Sch. of Informatics, Nagoya Univ.),³ 京大・白眉 (Hakubi Center, Kyoto Univ.),⁴ 京大・工・合成生物化学 (Dept. Synth. Biol. Chem., Grad Sch. of Eng., Kyoto Univ.),⁵ 阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.)**WS6**

C 会場 (407) / Room C (407)

6 月 18 日 (水) / June 18 (Wed) 16:00 ~ 18:30

English Session

タンパク質機能の理解と拡張 ～生成的デザインに向けて～**Understanding and expanding protein functions to enable their generative design****共催：学術変革領域研究 A「タンパク質機能のポテンシャルを解放する生成的デザイン学」**

最先端の計算化学や実験計測を駆使した動的構造解析により、瞬間的に現れるタンパク質の活性化状態を予測・直接観察し、その機能的分子メカニズムを理解できるようになりつつある。この理解に基づき、新しい機能を持つタンパク質の生成的分子デザインが実現できると考えられる。本ワークショップでは、実験・計算化学による原子レベルでのタンパク質機能の解明、および機能性改変タンパク質の創成をテーマに、タンパク質機能の理解と拡張について議論する。

Dynamic structural analysis using state-of-the-art computational and experimental techniques is now enabling us to predict and observe the transient active states of proteins, which is key to understanding their functions. These insights will lead to the generative design of proteins with novel functions. In this workshop, we will discuss protein functions in terms of both understanding and expansion.

オーガナイザー：寺井 琢也 (東京大学)、水野 操 (京都大学)

Organizers: Takuya Terai (UTokyo), Misao Mizuno (Kyoto Univ.)

[16:00] **はじめに****Opening Remarks**

○水野 操 (Misao Mizuno)

京都大学 (Kyoto Univ.)

WS6-1 [16:03] **ヘムタンパク質をもちいた光熱エネルギー変換による加熱操作**
Heating upon photothermal conversion by heme in proteins

○水野 操 (Misao Mizuno)

京大院・理・化 (Dept. of Chem., Kyoto Univ.)

- WS6-2** [16:23] **G 蛋白質共役型受容体制御機構とデザインの *in silico* 研究**
***In silico* studies on the regulation mechanisms and design of G protein-coupled receptors**
 ○北尾 彰朗 (Akio Kitao)
 東京科学大・生命理工 (Sch. of Life Sci. Tech., Science Tokyo)
- WS6-3** [16:48] **構造から見た光駆動型イオンチャネルの多様性**
The structural diversity of light-gated ion channels
 ○福田 昌弘¹ (Masahiro Fukuda)、岸 孝一郎² (Koichiro E. Kishi)、岡 貴之³ (Takayuki Oka)、
 辻村 真樹¹ (Masaki Tsujimura)、金 穂花¹ (Suhyang Kim)、中村 星王² (Seiwa Nakamura)、
 竹野 有香⁴ (Yuka Takeno)、池田 寿子¹ (Hisako Ikeda)、植村 智子⁵ (Tomoko Uemura)、
 劉 紅⁵ (Kehong Liu)、野村 紀通⁵ (Norimichi Nomura)、西村 陽介⁶ (Yosuke Nishimura)、
 長谷川 真純⁶ (Masumi Hasegawa)、吉澤 晋⁶ (Susumu Yoshizawa)、岩田 想⁵ (So Iwata)、
 加藤 英明^{1,2,4} (Hideaki E. Kato)
¹ 東大・先端研 (RCAST, The Univ. of Tokyo)、² 東大・総文 (Grad Sch. of Arts and Sci., The Univ. of Tokyo)、
³ ナニオンテクノロジーズジャパン株式会社 (Nanion Technologies Japan K.K.)、
⁴ 東大・理・生科 (Dept. of Bio. Sci., Grad Sch. of Sci., The Univ. of Tokyo)、
⁵ 京大・医・分子生体統御 (Dept. of Cell Biol., Grad. Sch. of Med., Kyoto Univ.)、
⁶ 東大・大気海洋研 (AORI, The Univ. of Tokyo)
- WS6-4** [17:13] **G タンパク質共役型受容体の生成的デザインに向けた構造解析**
Structural analysis for the generative design of G-protein-coupled receptors
 ○浅田 秀基 (Hidetsugu Asada)
 京都大学大学院医学研究科 (Graduate School of Medicine, Kyoto University)
- WS6-5** [17:38] **ヘムタンパク質の化学的エンジニアリングによる機能の改変と創出**
Modification and creation of functions through chemical engineering of hemoproteins
 ○大洞 光司 (Koji Oohora)
 阪大院工 (Grad. Sch. Eng., Osaka Univ.)
- WS6-6** [18:03] **二成分タンパク質集合体の設計と構造制御**
Design and Structural Control of Two-Component Protein Assemblies
 ○鈴木 雄太^{1,2} (Yuta Suzuki)
¹ 京大・iCeMS(iCeMS, Kyoto Univ.)、²JST, さきがけ (PRESTO, JST)
- [18:28] **総合討論**
Discussion
 ○寺井 琢也 (Takuya Terai)
 東京大学 (UTokyo)

タンパク質ふるまい研究が解き明かす新機能

Latest researches into protein behavior reveal new functions

タンパク質はfoldしてはじめて機能をもつだけでなく、液-液相分離に代表されるように、変性状態や集合状態での機能的側面も持つため、タンパク質のふるまい自体の研究が非常に魅力的である。本ワークショップでは、タンパク質ふるまい、すなわち、フォールディング、天然変性、オリゴマー凝集、アミロイド線維、そして液液相分離の最新知見を紹介し、タンパク質の状態と機能について議論する。

The structural behavior of proteins is fascinating because they function not only in folded states but also in intrinsically disordered and condensed states. This workshop will feature the latest findings on protein behavior, namely folding, aggregation, and condensation from the aspects of molecules, proteins, organelles, and cellular dynamics.

オーガナイザー：齋尾 智英（徳島大学）、奥村 正樹（東北大学）

Organizers: Tomohide Saio (Tokushima Univ.), Masaki Okumura (Tohoku Univ.)

[16:00] はじめに

Opening Remarks

○奥村 正樹 (Masaki Okumura)

東北大学 (Tohoku University)

WS7-1 [16:05] Advanced understanding of the amyloid structure and formation

○ Young-Ho Lee^{1,2,3,4}

¹Biopharmaceutical Research Center, Korea Basic Science Institute (KBSI),

²Bio-Analytical Science, University of Science and Technology (UST),

³Graduate School of Analytical Science and Technology (GRAST), Chungnam National University (CNU),

⁴Department of Systems Biotechnology, Chung-Ang University (CAU)

WS7-2 [16:30] 分子集合状態の制御

Regulation of molecular crowding

○森 英一朗 (Eiichiro Mori)

奈良医大・医・未来基礎医学 (Dept. Future Basic Med., Sch. of Med., Nara Med. Univ.)

WS7-3 [16:53] 小胞体内ストレス顆粒形成の理解

Understanding the stress granule formation mechanism in the endoplasmic reticulum

○渡部 マイ^{1,2} (Mai Watabe)、奥村 正樹^{1,2} (Masaki Okumura)

¹ 東北大・生命 (Grad. Sch. of Life Sci., Tohoku Univ.), ² 東北大・学際研 (FRIS, Tohoku Univ.)

WS7-4 [17:16] 生きた細胞内のタンパク質のふるまいを操作する技術開発

Towards arbitrary manipulation of protein dynamics inside living cells

○中村 秀樹^{1,2} (Hideki Nakamura)

¹ 京大・白眉センター (Hakubi Center, Kyoto Univ.),

² 京大・工・合成生物化学 (Dept. Synth. Biol. Chem., Sch. of Eng., Kyoto Univ.)

WS7-5 [17:41] 神経組織を再生する蛋白質の人工集積化

Functional assemblies of proteins for injured brain regeneration

○村岡 貴博 (Takahiro Muraoka)

東京農工大院・工 (Tokyo Univ. Agri. Tech.)

WS7-6 [18:04] **シャペロンのふるまいをキネティクスから理解する**
Kinetic Understanding of Chaperone-Mediated Protein Folding
 ○齋尾 智英 (Tomohide Saio)
 徳島大・先端酵素 (IAMS, Tokushima Univ.)

[18:27] **総合討論**
Discussion
 ○齋尾 智英 (Tomohide Saio)
 徳島大学 (Tokushima Univ.)

WS8 E 会場 (409) / Room E (409)
 6月18日(水) / June 18 (Wed) 16:00 ~ 18:30

English Session

データ同化とマルチスケールシミュレーションの協奏による生命機能解析の最前線 Frontier of Biomolecular Functional Analysis innovated by Data Assimilation and Multi-scale Simulation

ハード・ソフト両面の進歩によって分子動力学 (MD) 計算ではマイクロ～ミリ秒スケールの分子動態予測が可能となった。しかし、微視的な分子動態予測に基づいて生命機能を理解するためには、実験データに基づくベイズ最適化や対象の空間スケールに応じた適切なモデル選択が重要である。本ワークショップでは、シミュレーションによる生命機能研究の現状について理解を深めるべく、データ同化やマルチスケール MD 計算に加え、機械学習を用いた最新の研究成果を紹介する。

Multi-scale molecular dynamics (MD) simulation with integration of experimental data through Bayesian optimization has become a powerful technique to understand the actual biological functional events based on simulated microscopic molecular dynamics. In this workshop, we will introduce the latest research using not only data assimilation and multi-scale MD simulation, but also machine learning to help understanding the frontier of simulation-based biomolecular functional analysis.

オーガナイザー：伊東 真吾（理化学研究所）、大出 真央（大阪大学）
 Organizers: Shingo Ito (R-CCS), Mao Oide (UOsaka)

[16:00] **はじめに**
Opening Remarks

WS8-1 [16:05] **未解明構造状態の捕捉を目指した計算と実験の統合的アプローチ—膜輸送体研究の例**
Integrated approach to capture unresolved structural states through computation and experimentation: a study of membrane transport protein
 ○山下 敦子 (Atsuko Yamashita)
 阪大・蛋白研 (IPR, The Univ. of Osaka)

WS8-2 [16:28] **最新の拡張アンサンブル法を用いたマルチスケールな分子動力学計算**
New integrated enhanced sampling method for multi-scale simulation
 ○伊東 真吾¹ (Shingo Ito)、尾嶋 拓² (Hiraku Oshima)、杉田 有治^{1,3,4} (Yuji Sugita)
¹R-CCS、²兵庫県大・理 (Grad. School of Life Sci., Univ. of Hyogo)、³理研・BDR (RIKEN, BDR)、⁴理研・CPR (RIKEN, CPR)

WS8-3 [16:51] **線形スケーリング近似量子化学的手法による大規模生体・凝縮系の反応分子動力学シミュレーション**
Large-scale bio and condensed-phase reactive molecular dynamics simulations by linear-scaling approximate quantum chemical method
 ○西村 好史¹ (Yoshifumi Nishimura)、中井 浩巳^{1,2} (Hiromi Nakai)
¹早大・理工総研 (WISE, Waseda Univ.)、²早大・先進理工 (Sch. Adv. Sci. Eng., Waseda Univ.)

- WS8-4** [17:14] **MD アンサンブルリファインメントによるマルチドメイン蛋白質の動的構造解析**
Dynamic structure analysis of multi-domain protein via MD ensemble refinement
 ○大出 真央¹ (Mao Oide)、池谷 鉄兵² (Teppei Ikeya)、任 衛同³ (Weitong Ren)、森 貴治⁴ (Takaharu Mori)、
 伊藤 隆² (Yutaka Ito)、杉田 有治^{5,6,7} (Yuji Sugita)
¹ 阪大・蛋白研 (IPR, The Univ. of Osaka)、² 都立大・化学 (Dept. Chem., Tokyo Metrop. Univ.)、
³ 中国科学院大・温州研究院 (Wenzhou Inst., UCAS)、⁴ 理科大・化学 (Dept. Chem., Tokyo Univ. Sci.)、
⁵ 理研・CPR (CPR, RIKEN)、⁶ 理研・R-CCS (R-CCS, RIKEN)、⁷ 理研・BDR (BDR, RIKEN)
- WS8-5** [17:37] **An Integrative Multi-Scale Approach to Genome Molecular Modeling**
 ○Giovanni Bruno Brandani
 Department of Biophysics, Kyoto University
- WS8-6** [18:00] **生体分子凝縮体のマルチスケール分子動力学シミュレーション**
Multiscale molecular dynamics simulations of biomolecular condensates
 ○山本 詠士 (Eiji Yamamoto)
 慶應大・理工 (Dept. System Design Eng., Keio Univ.)
- [18:23] **おわりに**
Closing Remarks

WS9

F 会場 (402+403) / Room F (402+403)
 6月18日 (水) / June 18 (Wed) 16:00 ~ 18:30

Japanese Session

蛋白質科学会アーカイブ WS：生命科学研究を支える蛋白質生産技術の最前線 PSSJ Archives WS: Frontiers of Protein Production Technologies for Life Science Research

生命科学研究において、標的分子の試料調製は欠かせないプロセスであるが、一筋縄ではいかない蛋白質も多い。適切な生産系や精製系の選択に加えて、新しい技術を取り入れることがブレイクスルーに繋がる場合もある。本ワークショップでは、化学合成、無細胞発現系、大腸菌発現系、ブレヴィバチルス発現系、哺乳動物細胞発現系を用いた蛋白質生産法に精通した演者を招き、各系の特徴や、生産・精製に関する様々な技術を紹介する。

Sample preparation of target proteins is an essential process in life science research. In this workshop, five speakers with expertise in chemical synthesis, cell-free expression systems, and expression systems using *E. coli*, *Brevibacillus*, and mammalian cells will introduce the characteristics of each system, as well as various technologies related to protein production and purification.

オーガナイザー：有森 貴夫 (大阪大学)、矢木 真穂 (名古屋市立大学)

Organizers: Takao Arimori (UOsaka), Maho Yagi-Utsumi (Nagoya City Univ.)

[16:00] はじめに Opening Remarks

- 有森 貴夫 (Takao Arimori)
 大阪大学 (UOsaka)

WS9-1 [16:05] **大腸菌発現系を用いたタンパク質生産の効率化** **Improvement of protein production in *Escherichia coli***

- 加藤 晃代 (Teruyo Kato)
 名大院・生命農 (Grad. Sch. Bioagr. Sci., Nagoya Univ.)

- WS9-2** [16:33] **無細胞系であなたにも作れるプロテインアレイ**
Build Your Own Protein Arrays with Cell-Free Technology: A Practical Overview
 ○竹田 浩之 (Hiroyuki Takeda)
 愛媛大・PROS (PROS, Ehime Univ.)
- WS9-3** [17:01] **翻訳後修飾を持つ蛋白質の効率的な化学合成とその機能解析**
Chemical synthesis and functional analysis of post-translationally modified protein
 ○北條 裕信 (Hironobu Hojo)
 阪大・蛋白研 (Institute for Protein Research, Osaka Univ.)
- WS9-4** [17:29] **ブレヴィバチルスを用いた分泌発現系の最適化とその利用**
Optimization and utilization of the secretory expression system using *Brevibacillus*
 ○松長 遼^{1,2} (Ryo Matsunaga)、津本 浩平^{1,2,3} (Kouhei Tsumoto)
¹ 東大・工・バイオエンジニア (Dept. of Bioeng., Sch. of Eng., Univ. of Tokyo)、
² 東大・工・化生 (Dept. of Chem. Biotech., Sch. of Eng., Univ. of Tokyo)、
³ 東大・医科研 (Inst. of Med. Sci., Univ. of Tokyo)
- WS9-5** [17:57] **哺乳動物細胞を用いた分泌タンパク質の生産**
Production of secreted proteins using mammalian cell systems
 ○有森 貴夫 (Takao Arimori)
 阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.)
- [18:25] **おわりに**
Closing Remarks
 ○矢木 真穂 (Maho Yagi-Utsumi)
 名古屋市立大学 (Nagoya City Univ.)

天然有機化合物生合成酵素の機能予測・解析・改変の最前線

Frontiers of Functional Prediction, Characterization, and Alteration of Natural Product Biosynthetic Enzymes

共催：学術変革領域研究 A「予知生合成科学」

オーガナイザー：寺田 透（東京大学）、新井 宗仁（東京大学）

Organizers: Tohru Terada (UTokyo), Munehito Arai (UTokyo)

WS10-1 ~~[16:00]~~ 経験的アプローチと理論的アプローチによる酵素の機能予測

~~[15:40]~~ Empirical and theoretical approaches to enzyme function prediction

○寺田 透 (Tohru Terada)

東大・院農・応生工 (Dept. of Biotechnol., Grad. Sch. of Agri. and Life Sci., The Univ. of Tokyo)

WS10-2 ~~[16:26]~~ 金属酵素の基質誤認識と変異導入を併用する新奇金属酵素反応系の開発

~~[16:05]~~ Development of a Novel Metalloenzyme Reaction System Combining Substrate Misrecognition and Mutagenesis

○莊司 長三 (Osami Shoji)

名大・院理 (Grad. Sch. Sci., Nagoya Univ.)

WS10-3 ~~[16:50]~~ X線自由電子レーザーによる生合成酵素の巧みな反応過程の可視化

~~[16:30]~~ Visualization of the reaction process of biosynthetic enzymes using X-ray free electron lasers

○南後 恵理子 (Eriko Nango)

東北大学多元物質科学研究所 (Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University)

WS10-4 ~~[17:16]~~ 酵素のフォールディングと機能的ダイナミクスの理論的研究

~~[16:55]~~ Theoretical studies of enzyme folding and functional dynamics

○新井 宗仁^{1,2,3} (Munehito Arai)

¹ 東大・総合文化・生命環境 (Dept. Life Sci., Univ. Tokyo), ² 東大・教養 (Col. Arts and Sci., Univ. Tokyo),

³ 東大・理・物理 (Dept. Phys., Univ. Tokyo)

WS10-5 ~~[17:40]~~ 機械学習を用いたフラビン依存性酸化酵素の機能改変

~~[17:20]~~ Functional Modification of Flavin-containing Monooxygenase through Machine Learning Methodology

○渡辺 賢二 (Kenji Watanabe)

静岡県大・薬 (Dept. Pharm. Sci., Univ. Shizuoka)

WS10-6 ~~[18:05]~~ 新規ペプチド修飾酵素の機能拡張による大環状複雑骨格の創成

~~[17:45]~~ Macrocyclic complex skeletons generated by novel peptide modification enzymes

○脇本 敏幸 (Toshiyuki Wakimoto)

北大・薬 (Faculty of Pharm., Hokkaido Univ.)

血友病の蛋白質科学、抗体医薬治療と遺伝子治療

Protein Science in Hemophilia, Treatment by Antibody Drugs and Gene Therapy

オーガナイザー：内山 進（大阪大学）、谷中 冴子（東京科学大学）

Organizers : Susumu Uchiyama (UOsaka), Saeko Yanaka (Science Tokyo)

~~[16:00]~~ はじめに

[15:40] Opening Remarks

○内山 進 (Susumu Uchiyama)

大阪大学 (UOsaka)

WS11-1 ~~[16:05]~~ 凝固第 VIII 因子と第 IX 因子の蛋白質科学・生化学

[15:45] Protein Science and Biochemistry of Blood Coagulation Factors VIII and IX

○野上 恵嗣 (Keiji Nogami)

奈良県立医科大学・小児科 (Dept Pediatrics, Nara Medical University)

WS11-2 ~~[16:35]~~ 血液凝固第 VIII 因子の構造生物学

[16:15] Structural Biology of Coagulation Factor FVIII

○堀中 葵寛 (Kio Horinaka)、濡木 理 (Osamu Nureki)

東大・理・生物科学 (Dept. of Bio. Sci., Grad Sch. of Sci., The Univ. of Tokyo)

WS11-3 ~~[16:50]~~ 血液凝固因子の分泌を司るパスポート配列のバイオ医薬生産への応用可能性

[16:30] Biopharmaceutical applications of the passport sequence controlling blood coagulation factor secretion

○加藤 晃一^{1,2} (Koichi Kato)、矢木 宏和^{1,2} (Hirokazu Yagi)

¹ 自然科学研究機構・生命創成探究センター (ExCELLS, NINS)、

² 名古屋市大・院薬 (Grad Sch. of Pharm. Sci., Nagoya City Univ.)

WS11-4 ~~[17:10]~~ 血友病の病態と治療

[16:50] Pathophysiology and Treatment of Hemophilia

○大森 司^{1,2} (Tsukasa Ohmori)

¹ 自治医科大学医学部生化学講座病態生化学部門 (Dept. of Biochem., Jichi Med. Univ.),

² 自治医科大学遺伝子治療研究センター (Center for Gene Therapy Research)

WS11-5 ~~[17:35]~~ 血友病における新規治療薬の多様化と新たな臨床検査の課題

[17:15] Novel Therapeutic Agents for Hemophilia: Diverse Mechanisms of Action and Emerging Clinical Laboratory Challenges

○山口 知子^{1,2} (Tomoko Yamaguchi)、稲葉 浩¹ (Hiroshi Inaba)、萩原 剛^{1,2} (Takeshi Hagiwara)、

木内 英¹ (Ei Kinai)

¹ 東京医科大学病院・臨床検査医学科 (Department of Clinical Laboratory, Tokyo Medical University),

² 荻窪病院・血液凝固科 (Department of Blood Coagulation, Ogikubo Hospital)

WS11-6 ~~[17:55]~~ 次世代エミシズマブの創成

[17:35] Developing Next-Generation Emicizumab

○市来 美菜 (Mina Ichiki)

中外製薬・タンパク質科学研究部 (Protein Science dept., Chugai Pharma)

WS11-7 ~~[18:15]~~ アデノ随伴ウイルスベクターによる遺伝子治療の製造と品質管理に関する現状と課題

[17:55] Current Status and Issues Related to Manufacturing and Quality Control of Gene Therapy Using Adeno-Associated Virus Vectors

○内山 進 (Susumu Uchiyama)

阪大・工・生物工学 (Dept. Biotech. Grad. Sch. Eng., The Univ. of Osaka)

翻訳研究の最近の動向 ~遺伝暗号解読の忠実性と正確性に焦点を当てて~
Research advances in translation
~Focuses on fidelity and accuracy in genetic code decoding~

オーガナイザー：丹澤 豪人 (大阪大学)、金森 崇 (ジーンフロンティア (株))
Organizers : Takehito Tanzawa (UOsaka), Takashi Kanamori (GeneFrontier Corp.)

~~[16:00]~~ はじめに
[15:40] Opening Remarks

WS12-1 ~~[16:06]~~ 翻訳開始段階におけるコドン認識の柔軟性と正確性を司る分子基盤
[15:46] Molecular basis for the flexibility and accuracy of codon recognition during translational initiation
○丹澤 豪人¹ (Takehito Tanzawa)、Matthieu, G. Gagnon²
¹ 阪大・蛋白研 (IPR, Osaka Univ.), ² テキサス州大・医・微生物学免疫学 (Dept. of Microbiol. & Immunol., UTMB)

WS12-2 ~~[16:30]~~ 翻訳伸長初期段階におけるタンパク質合成の品質管理
[16:10] Quality control of protein synthesis in the early elongation stage
○長尾 翌手可¹ (Asuteka Nagao)、中西 由衣¹ (Yui Nakanishi)、山口 悠太郎¹ (Yutaro Yamaguchi)、
三科 圭史¹ (Yoshifumi Mishina)、唐牛 南¹ (Minami Karoji)、戸谷 尊文¹ (Takafumi Toya)、
藤田 智也² (Tomoya Fujita)、岩崎 信太郎² (Shintaro Iwasaki)、宮内 健常¹ (Kenryo Miyauchi)、
坂口 裕理子¹ (Yuriko Sakaguchi)、鈴木 勉¹ (Tsutomu Suzuki)
¹ 東大・工・化生 (Dept. of ChemBio. Eng., The Univ. of Tokyo)、² 理化学研究所 (RIKEN)

WS12-3 ~~[16:54]~~ タンパク質の安定的発現を実現させるタンパク質の解析
[16:34] The ABCF proteins in *Escherichia coli* individually cope with 'hard-to-translate' nascent peptide sequences
○茶谷 悠平¹ (Yuhei Chadani)、田口 英樹² (Hideki Taguchi)
¹ 岡山大・研究院 (Fac. of Env., Life, Nat. Sci. and Tech., Okayama Univ.)、
² 東京科学大・総合研究院 (Inst. of Integ. Res., Inst. of Science Tokyo)

WS12-4 ~~[17:18]~~ tRNA wobbleU 修飾を構成する 2 つの修飾基の同時欠失が生物にもたらす影響についての解析
[16:58] Effects of the deletion of the tRNA wobbleU modification in different organisms
○中井 由実 (Yumi Nakai)
大阪医科薬科大学・医・生化学 (Dept. of Biochem., Med., OMPU)

WS12-5 ~~[17:42]~~ コドンの解読を変化させる tRNA 2- セレノウリジン修飾の触媒酵素の研究
[17:22] Studies on the catalytic enzyme of tRNA 2-selenouridine modification altering codon decoding
○碓井 拓哉¹ (Takuya Usui)、石川 結女¹ (Yume Ishikawa)、中村 彰良² (Akiyoshi Nakamura)、
稲葉 (井上) 理美³ (Satomi Inaba-Inoue)、尾瀬 農之³ (Toyoyuki Ose)、姚 閔³ (Min Yao)
¹ 北大・院生命・生命 (Grad. Sch. of Life. Sci., Hokkaido Univ.)、² 産総研・生物 (Ins. of Bio. Pro., AIST)、
³ 北大・先端生命・融合 (Adv. Life. Sci., Hokkaido Univ.)

WS12-6 ~~[18:06]~~ 翻訳システムの再構成から紐解く遺伝暗号解読のメカニズム
[17:46] Unraveling the mechanism of genetic code decoding via reconstitution of a translation system
○清水 義宏 (Yoshihiro Shimizu)
理研・BDR (RIKEN BDR)

生体内現象の NMR 観測の新展開

Recent advances in the observation of in vivo phenomena by NMR spectroscopy

オーガナイザー：木川 隆則 (理化学研究所)、伊藤 隆 (東京都立大学)

Organizers: Takanori Kigawa (RIKEN), Yutaka Ito (Tokyo Metropolitan Univ.)

WS13-1 ~~[16:00]~~ 細胞内分子クラウディング環境が蛋白質の立体構造に与える影響

~~[15:40]~~ Effects of the intracellular macromolecular crowding on protein structures

○伊藤 隆 (Yutaka Ito)、池谷 鉄兵 (Teppei Ikeya)

都立大・理・化学 (Dept. of Chem., Tokyo Metropolitan Univ.)

WS13-2 ~~[16:26]~~ NMR を用いた血清環境における抗体の相互作用解析

~~[16:05]~~ NMR Characterization of Serum Protein Interactions Affecting Therapeutic Antibody Functionality

○谷中 冴子^{1,2} (Saeko Yanaka)、加藤 晃一² (Koichi Kato)

¹ 東京科学大・総合研究院・フロ研 (Science Tokyo, IIR, MSL)、² 自然科学研究機構・生命創成探究セ (ExCELLS)

WS13-3 ~~[16:50]~~ ヒト生細胞中における核酸の構造、ダイナミクス及び蛋白質との相互作用のインセル NMR 法による解析

~~[16:30]~~ Structure, dynamics and interaction with protein of nucleic acids in living human cells as revealed by in-cell NMR

○片平 正人 (Masato Katahira)

京大・エネルギー理工学研究所 (Inst. Adv. Eng., Kyoto Univ.)

WS13-4 ~~[17:16]~~ FUS の液滴・線維形成機構の in-cell NMR 解析

~~[16:55]~~ Structural insights into liquid-liquid phase separation (LLPS) mechanism of FUS using in-cell NMR

○西田 紀貴 (Noritaka Nishida)

千葉大・院薬 (Grad. Sch. Phram. Sci., Chiba Univ.)

WS13-5 ~~[17:40]~~ 医学分野におけるメタボロミクスの進展

~~[17:20]~~ Progress of Metabolomics in Medical Science

○小柴 生造 (Seizo Koshiba)

東北大・メガバンク (ToMMo, Tohoku Univ.)

WS13-6 ~~[18:05]~~ NMR による細胞内環境におけるタンパク質の計測

~~[17:45]~~ Molecular Observation of Proteins in the Native Cellular Environment by NMR

○木川 隆則 (Takanori Kigawa)

理研・生命医科学 (RIKEN IMS)

そのクライオ電子顕微鏡構造大丈夫？

～構造解析の工夫や結果の検証方法をみんなで共有しよう！～

Towards Reliable Cryo-EM Structures

— Let's Share Tips for Analysis and Validation Methods!

2017 年のノーベル化学賞受賞以来、クライオ電子顕微鏡を用いた単粒子解析やトモグラフィー法による構造決定が多くなされている。その一因として、データ測定にかかる時間の短縮、解析方法の多様化し、それに伴い様々なソフトウェアパッケージも利用できるようになったことが挙げられる。一方で、構造解析方法の工夫や解析結果の検証方法に関しては、解析者の経験や知識に依存する部分も多い。本ワークショップでは、若手研究者を中心に、解析や検証の方法に関する独自の工夫、これらの手順を自動化するためのツール開発等について聴講者の方々と共有する場を提供したい。

Since the 2017 Nobel Prize in Chemistry, cryo-EM and cryo-ET structure determination have surged. Shorter data collection times, diverse analysis methods, and accessible software contribute to this growth. Focusing on early-career researchers, this workshop aims to share original idea in analysis and verification techniques, as well as thier automation.

オーガナイザー：稲葉（井上）理美（北海道大学）、守屋 俊夫（高エネルギー加速器研究機構）

Organizers : Satomi Inaba-Inoue (Hokkaido Univ.), Toshio Moriya (KEK)

[8:30] はじめに

Opening Remarks

○守屋 俊夫 (Toshio Moriya)

高エネルギー加速器研究機構 (High Energy Accelerator Research Organization)

WS14-1 [8:36] クラウドを活用したクライオ電顕解析環境構築のコツ

Tips and Hacks for CryoEM Analysis in the Cloud

○宮本 大輔 (Daisuke Miyamoto)

AWS Japan

WS14-2 [8:59] DeepMASC: Automated Mask Creation and Class Selection in Single Particle Analysis Empowered by Deep Protein Probability Measures of Cryo-EM Maps

○ Han Zhu¹、Daisuke Kihara²、Toshio Moriya³

¹Department of Computer Science, Purdue University,

²Department of Computer Science and Department of Biological Sciences, Purdue University,

³Structural Biology Research Center, Photon Factory, Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

WS14-3 [9:22] DAQ-Score Database and DAQ-refine: Deep-learning Based Quality Estimation and Refinement of Cryo-EM Derived Protein Models

○中村 司^{1,2} (Tsukasa Nakamura)、寺師 玄記² (Genki Terashi)、Xiao Wang³、木原 大亮^{2,3} (Daisuke Kihara)

¹ 高エネ機構・物構研・構造生物 (SBRC, IMSS, KEK)、²Dept. of Biol. Sci., Purdue Univ.,

³Dept. of Comp. Sci., Purdue Univ.

WS14-4 [9:45] Improved Cryo-EM Resolution of Enterococcus hirae V-ATPase: Structural Insights into the Full Complex

○ Yuan-E Lee¹、Raymond Burton-Smith^{1,3}、Akihiro Otomo^{2,3}、Kano Suzuki⁵、

Tsukasa Nakamura⁴、Toshio Moriya⁴、Takeshi Murata⁵、Ryota Iino^{2,3}、Kazuyoshi Murata^{1,3}

¹ExCELLS/NIPS、²IMS、³SOKENDAI、⁴KEK、⁵Chiba University

WS14-5 [10:08] hERG チャネルの構造解析と阻害剤の結合様式

Structural Analysis of the hERG Channel and Binding Mode of Inhibitors

○宮下 靖臣^{1,2} (Yasuomi Miyashita)、守屋 俊夫³ (Toshio Moriya)、加藤 孝郁⁴ (Takafumi Kato)、川崎 政人³ (Masato Kawasaki)、安田 賢司^{2,6} (Satoshi Yasuda)、安達 成彦^{3,5} (Naruhiko Adashi)、鈴木 花野^{2,6} (Kano Suzuki)、小笠原 諭^{2,6} (Satoshi Ogasawara)、斎藤 哲一郎¹ (Tetsuichiro Saito)、千田 俊哉³ (Toshiya Senda)、村田 武士^{2,6} (Takeshi Murata)

¹ 千葉大院・医 (Graduate School of Medicine, Chiba Univ.)、² 千葉大院・理 (Graduate School of Science, Chiba Univ.)、

³ 高エネ研・構造生物 (SBRC, KEK)、⁴ オックスフォード大 (Department of Biochemistry, Univ. Oxford)、

⁵ 筑波大・生存ダイナミクス研究センター (TARA, Univ. of Tsukuba)、

⁶ 千葉大・膜タンパク質研究センター (Membrane Protein Research Center, Chiba Univ.)

WS14-6 [10:31] Cryoelectron tomography: current state, challenges, future directions

○Oleg Sitsel

Marine Structural Biology Unit, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University

[10:54] 総合討論

Discussion

○稲葉 (井上) 理美 (Satomi Inaba-Inoue)

北海道大学 (Hokkaido University)

WS15 C 会場 (407) / Room C (407)
6 月 20 日 (金) / June 20 (Fri) 8:30 ~ 11:00

Japanese Session

構造生物学+プラスアルファで解き明かす光合成生物のユビキティ

Unraveling the Ubiquity of Photosynthetic Organisms through Structural Biology and Beyond

共催：学術変革領域研究 A「光合成ユビキティ：あらゆる地球環境で光合成を可能とする超分子構造制御」

光合成生物は、熱帯から極地に至るまで、地球上のあらゆる環境に適応しています。このように、地球上の「どこでも光合成を行う能力（光合成ユビキティ）」を可能にした要因として、タンパク質およびタンパク質-色素複合体の環境適応が挙げられます。本セッションでは、光合成生物が持つタンパク質のユニークな機能を多様な研究手法で解明している研究者に、最新の研究成果を発表していただきます。

Photosynthetic organisms have adapted to very diverse environment on Earth, from the tropics to the poles. One key factor enabling this ability to perform photosynthesis anywhere on Earth (photosynthesis ubiquity) is the environmental adaptation of proteins and protein-pigment complexes. In this session, researchers investigating the unique functions of proteins from photosynthetic organisms through a variety of research methods will present their latest findings.

オーガナイザー：川本 晃大 (大阪大学)、池上 貴久 (横浜市立大学)

Organizers: Akihiro Kawamoto (UOsaka), Takahisa Ikegami (Yokohama City Univ.)

WS15-1 [8:30] 紅色細菌 Rhodobacter 類の光合成膜タンパク質アッセムブリ機構とクロマトフォア膜の可視化 Mechanism of photosynthetic membrane protein complex assembly and visualisation of Rhodobacter chromatophore vesicles

○山形 敦史 (Atsushi Yamagata)

理研・生命医科学 (IMS, RIKEN)

- WS15-2** [8:50] **色素と光捕集系の構造から見た海岸性緑藻類の青緑色光捕集戦略**
Blue-green light utilization strategy of intertidal green algae as viewed from the structures of pigments and light-harvesting complexes
 ○藤井 律子 ^{1,2} (Ritsuko Fujii)
¹ 阪公大・人工光合成研究センター (ReCAP, Osaka Metropolitan Univ.),
² 阪公大・院理・化 (Dept. of Chem., Grad. Sch. of Sci., Osaka Metropolitan Univ.)
- WS15-3** [9:10] **構造生物学と理論化学で解き明かす光合成光捕集のユビキティ**
Unraveling the ubiquity of photosynthetic light-harvesting systems through structural biology and theoretical chemistry
 ○斉藤 圭亮 ^{1,2} (Keisuke Saito)、邱 林昊 ² (Linhao Qiu)、石北 央 ^{1,2} (Hiroshi Ishikita)
¹ 東大・先端研 (RCAST, The Univ. of Tokyo)、² 東大・院・工 (Grad Sch. of Eng.)
- WS15-4** [9:30] **異なる温度環境に生息する3種の藻類由来のフェレドキシンの構造比較と熱安定性の評価**
Structural comparison and evaluation of thermal stability of ferredoxins from three algal species living in different temperature
 ○山本 那菜 ^{1,2} (Nana Yamamoto)、大西 裕介 ¹ (Yusuke Ohnishi)、田中 秀明 ^{1,2} (Hideaki Tanaka)、
 栗栖 源嗣 ^{1,2} (Genji Kurisu)
¹ 阪大・蛋白研 (IPR, The Univ. of Osaka)、² 阪大・理 (Grad. Sch. of Sci., The Univ. of Osaka)
- WS15-5** [9:50] **光合成二酸化炭素固定酵素 Rubisco の触媒速度上昇の構造基盤**
Structure basis for the increased catalytic rate of Rubisco
 ○松村 浩由 ¹ (Hiroyoshi Matsumura)、矢守 航 ² (Wataru Yamori)、中里 一星 ² (Issei Nakazato)、
 Yuchen Qu²、宮田 知子 ³ (Tomoko Miyata)、上原 了 ¹ (Ryo Uehara)、能登 悠真 ¹ (Yuma Noto)、
 難波 啓一 ^{3,4} (Keiichi Namba)、深山 浩 ⁵ (Hiroshi Fukayama)、有村 慎一 ² (Shin-ichi Arimura)
¹ 立命館大・院生命 (Grad. Sch. of Life Sci., Ritsumeikan Univ.),
² 東大・院農学生命 (Grad. Sch. of Agri. Life Sci., Univ. of Tokyo),
³ 阪大・院生命機能 (Grad. Sch. of Frontier Biosci., Osaka Univ.),
⁴ 阪大・日本電子 YOKOGUSHI 協働研 (JEOL YOKOGUSHI Res. Alliance Lab., Osaka Univ.),
⁵ 神戸大・院農学 (Grad. Sch. of Agri. Sci., Kobe Univ.)
- WS15-6** [10:10] **光センサータンパク質に存在する、水素結合において二刀流のリシン残基の同定**
Lysine, a two-way player for H-bonding in a photoreceptor protein
 ○三島 正規 (Masaki Mishima)
 東薬大・薬・分子生物物理 (Molecular Biophys, Dept. of Pharm, Tokyo Univ. of Pharm and Life Sci.)
- WS15-7** [10:30] **近赤外光で駆動する光合成タンパク質複合体構造の解明**
Structural elucidation of near-infrared light-driven photosynthetic protein complexes
 ○川上 恵典 (Keisuke Kawakami)
 理研・放射光科学研究センター・生体機構 G (RIKEN SPring-8 Center)
- [10:50] **総合討論**
Discussion

元素生物学：生命を構成する多様な元素とタンパク質の相互作用

Element-based Biology: Interactions between diverse elements and proteins in living systems

生命は進化を通じて利用可能な元素を拡張してきたと考えられている。一つの有力な仮説は、進化により新たに生じたタンパク質が、従来利用できなかった元素と相互作用することで、その元素が生命活動に組み込まれたというものである。本ワークショップでは、タンパク質と様々な元素の相互作用を分子、個体、さらには進化の視点から紹介し、生命がどのように利用元素を変遷させてきたのか、そしてそのさらなる拡張の可能性について議論する。

Life is thought to have expanded its use of elements through evolution. One hypothesis suggests that evolutionarily new proteins enabled interactions with previously inaccessible elements, integrating them into physiological processes. We will discuss protein-element interactions, how life's elemental usage has shifted over time, and the potential for further expansion.

オーガナイザー：川上 了史 (慶應義塾大学)、古川 良明 (慶應義塾大学)

Organizers : Norifumi Kawakami (Keio Univ.), Yoshiaki Furukawa (Keio Univ.)

[8:30] はじめに

Opening Remarks

○川上 了史 (Norifumi Kawakami)

慶應大学 (Keio Univ.)

WS16-1 [8:35] ルテニウム存在下で進化した大腸菌株の生化学的解析

Biochemical analysis of an *Escherichia coli* strain evolved in the presence of ruthenium ions

○川上 了史 (Norifumi Kawakami)、井対 理桜 (Rio Itsui)、宮本 憲二 (Kenji Miyamoto)

慶應大・理工 (Fac. Sci. Tech., Keio Univ.)

WS16-2 [8:55] 生命におけるセレンの役割を探る：セレンタンパク質の機能、構造、進化の解明

The role of selenium in life: insights into the function, structure, and evolution of selenoproteins

○三原 久明 (Hisaaki Mihara)

立命大・生命 (Coll. Life Sci., Ritsumeikan Univ.)

WS16-3 [9:19] モリブデンおよびタングステンの輸送・貯蔵タンパク質における相互作用

Interactions in molybdate and tungstate transport and storage proteins

○藤枝 伸宇 (Nobutaka Fujieda)

大阪公大・院・農 (Osaka Metro. Univ.)

WS16-4 [9:43] 亜鉛イオンの相対量に依存した神経変性疾患関連タンパク質 SOD1 の構造安定性

Structural stability of neurodegenerative disease-associated SOD1 regulated by relative amount of zinc ions

○古川 良明 (Yoshiaki Furukawa)

慶応大・理工 (Dept. of Chem., Keio Univ.)

WS16-5 [10:07] ヒザラガイの磁鉄鉱歯形成を制御する新規タンパク質 RTMP1 の機能解析

Functional analysis of the novel protein RTMP1 regulating magnetite tooth formation in chitons

○根本 理子 (Michiko Nemoto)

岡山大院・環境生命自然科学 (Grad. Sch. Environ. Life Natural Sci., Okayama Univ.)

WS16-6 [10:31] 無機栄養条件に応答した植物の翻訳制御**Translational regulation in plants in response to inorganic nutrient conditions**

○藤原 徹 (Toru Fujiwara)

東大・農 (Grad Sch Agric Life Sci, The Univ. of Tokyo)

[10:55] **おわりに****Closing Remarks**

○古川 良明 (Yoshiaki Furukawa)

慶応大学 (Keio Univ.)

WS17 E 会場 (409) / Room E (409)
6月20日 (金) / June 20 (Fri) 8:30 ~ 11:00

Japanese Session

細胞・構造生物学が解き明かす免疫関連シグナル誘導の最前線と創薬応用**The latest research on immune-related signal transduction and its application to drug discovery, revealed by cell and structural biology**

昨今、蛋白質を研究するためのさまざまな方法論が開発されており、これらを融合することにより、これまで説明しきれなかった生命現象を一層深く理解し、また新技術へと応用することができる。本ワークショップでは、免疫系発動を担うシグナル伝達・誘導の分子機構を細胞・構造生物学の手法を組み合わせることではじめて解き明かすことができた最先端の研究例を踏まえ、蛋白質科学研究の役割や創薬研究なども含めた今後の展開について議論したい。

Recently, various methodologies have been developed to study proteins. By integrating these methodologies, we can gain a deeper understanding of previously unexplained biological phenomena and apply them to new technologies. In this workshop, we will discuss the role of protein science research and its future development, including drug discovery research, based on cutting-edge research that has elucidated the molecular mechanisms of signal transduction and induction that are responsible for activation of the immune system by combining cellular and structural biology.

オーガナイザー：田中 良和 (東北大学)、真壁 幸樹 (山形大学)、尾瀬 農之 (北海道大学)

Organizers: Yoshikazu Tanaka (Tohoku Univ.), Koki Makabe (Yamagata Univ.), Toyoyuki Ose (Hokkaido Univ.)

WS17-1 [8:30] **概要説明****Overview**

○真壁 幸樹 (Koki Makabe)

山形大学・院理工 (Yamagata Univ.)

WS17-2 [8:35] **多様な免疫抑制タンパク質 HLA-G と受容体群の構造基盤と創薬応用****Structural basis of immunosuppressive HLA-G proteins and the receptors as drug targets**

○黒木 喜美子 (Kimiko Kuroki)、前仲 勝実 (Katsumi Maenaka)

北大・薬 (Faculty of Pharmaceutical Sciences, Hokkaido Univ.)

WS17-3 [9:05] **ケモカイン受容体を模倣するサイトメガロウイルス GPCR による宿主 G タンパク質シグナル制御の構造基盤****Structural basis of host G protein signal regulation by human cytomegalovirus GPCRs mimicking chemokine receptors**

○堤 尚孝 (Naotaka Tsutsumi)

科学大・総合 (IIR, Science Tokyo)

WS17-4 [9:35] **RNA ウイルスによるヒト JAK-STAT 経路不活化の分子メカニズムの解析****Molecular mechanisms of viral immune evasion via JAK-STAT pathway inactivation**○南 未来¹ (Miku Minami)、尾瀬 農之^{1,2} (Toyoyuki Ose)¹ 北大院・生命科学 (Grad. School. Life Sci., Hokkaido Univ.)、² 北大院・先端生命 (Faculty of Advanced Life Sci., Hokkaido Univ.)

WS17-5 [9:55] **B 細胞抑制性共受容体 CD72 によるリガンドのパターン認識**
Pattern recognition of ligands by the B cell inhibitory co-receptor CD72
 ○沼本 修孝 (Nobutaka Numoto)
 岡山大・基礎研 (Res. Inst. Interdiscip. Sci.)

WS17-6 [10:25] **ドメイン連結順の変更に伴うがん二重特異性抗体の活性変化の分子機構**
Molecular mechanisms of activity enhancement of bispecific antibody induced by changes in the domain rearrangement
 佐藤 恭平¹ (Kyohei Sato)、上原 史朗¹ (Shiro Uehara)、次田 篤史¹ (Atsushi Tsugita)、
 石井 麻友香² (Mayuka Ishii)、石山 紫衿瑠³ (Shieru Ishiyama)、前島 敦² (Atsushi Maejima)、
 中原 維新² (Ishin Nakahara)、名塚 美冴² (Misae Nazuka)、松井 崇^{1,4} (Takashi Matsui)、
 横山 武司¹ (Takeshi Yokoyama)、熊谷 泉² (Izumi Kumagai)、真壁 幸樹³ (Koki Makabe)、
 浅野 竜太郎² (Ryutaro Asano)、○田中 良和¹ (Yoshikazu Tanaka)
¹ 東北大・院生命 (Grad. Sch. Life Sci., Tohoku Univ.),
² 東京農工大・院工 (Grad. Sch. of Eng., Tokyo Univ. of Agr. and Tech.),
³ 山形大・院理工 (Grad. Sch. Sci. and Eng., Yamagata Univ.), ⁴ 北里大・理 (Sch. Sci., Kitasato Univ.)

WS18 F 会場 (402+403) / Room F (402+403)
 6月20日 (金) / June 20 (Fri) 8:30 ~ 11:00

Japanese Session

細胞制御機構の包括的理解のためのプロテオーム解析技術

Proteomic Technologies for Comprehensive Insights into Cellular Regulatory Mechanisms

近年のプロテオーム解析技術の進歩によって、単純なタンパク質の発現量解析のみならず、リン酸化や糖鎖などの翻訳後修飾を受けたタンパク質の解析、タンパク質局在や相互作用解析などを簡便に網羅的に行えるようになった。本セッションでは、細胞内の各種の分子機構解明に対して、プロテオーム解析技術がどのように使用されているかという点に焦点をあて、主にプロテオミクス研究者による研究例を紹介する。

Proteomics advancements enable efficient and comprehensive analyses of protein expression, post-translational modifications (such as phosphorylation, glycosylation, etc.), and protein localization and interactions. This session will focus on the application of proteomic technologies to understand cellular molecular mechanisms, featuring case studies from the field.

オーガナイザー：小寺 義男 (北里大学)、太田 信哉 (北海道大学)
 Organizers: Yoshio Kodera (Kitasato Univ.), Shinya Ohta (Hokkaido Univ.)

WS18-1 [8:30] **クロスリンク MS を用いたタンパク質の高次構造解析**
Crosslink MS for protein structural analysis
 ○丹羽 達也 (Tatsuya Niwa)
 東科大・研究院・細胞センター (Science Tokyo, IIR, CBC)

WS18-2 [8:55] **Sel-TCP-MS 法による翻訳制御因子の新規同定**
Identification of novel translational regulatory factors by Sel-TCP-MS
 ○白石 千瑳 (Chisa Shiraishi)、市原 知哉 (Kazuya Ichihara)、白石 大智 (Taichi Shiraishi)、
 松本 有樹修 (Akinobu Matsumoto)
 名大・理 (Sch. Sci. Nagoya Univ.)

WS18-3 [9:20] **細胞内発現タンパク質の全貌を捉える真プロテオーム解析への挑戦**
Challenge in true proteome analysis detecting the complete expression profiles in cells
 ○川島 祐介 (Yusuke Kawashima)
 かずさ DNA 研 (Kazusa DNA Res. Inst.)

WS18-4 [9:45] **プロテオームデータの共有と再利用**
Sharing and Reuse of Proteome Data

○河野 信 (Shin Kawano)

北里大・未来工・データサイエンス (Dept. of Data Sci., Sch. of Fron. Eng., Kitasato Univ.)

WS18-5 [10:10] **「Proximity labeling 用組換えウイルス」を用いたウイルス受容体・感染補助因子タンパク質の解析**
Assay for virus receptor and cofactor molecules using recombinant virus used for proximity labeling○小谷 典弘^{1,2,3} (Norihiro Kotani)、山下 主税^{1,3} (Chikara Yamashita)、小松 久美子⁴ (Kumiko Komatsu)、水野 洋介⁴ (Yosuke Mizuno)、成道 豊⁵ (Yutaka Narimichi)、若林 佳輝⁵ (Yoshiki Wakabayashi)、紅林 佑希⁵ (Yuuki Kurebayashi)、岩佐 健介¹ (Kensuke Iwasa)、柳下 - 姜 楠¹ (Nan Yagishita-Kyo)、山本 梓司¹ (Shinji Yamamoto)、吉川 圭介¹ (Keisuke Yoshikawa)、淡路 健雄¹ (Takeo Awaji)、高橋 忠伸⁵ (Tadanobu Takahashi)、竹内 英之⁵ (Hideyuki Takeuchi)、本家 孝一⁶ (Koichi Honke)¹ 埼玉医大・医・薬理学 (Dept. of Pharm., Saitama Med. Univ.)、² 埼玉医大・医学研究センター (Med. Res. Ctr., Saitama Med. Univ.)、³ 埼玉医大・医・生化学 (Dept. of Biochem., Saitama Med. Univ.)、⁴ 埼玉医大・中央研究施設 (Biomed. Res. Ctr., Saitama Med. Univ.)、⁵ 静岡県大・薬・生化学 (Dept. of Biochem., Sch. of Pharm. Sci., Univ. of Shizuoka)、⁶ 高知大・医・生化学 (Dept. of Biochem., Kochi Univ. Med. Sch.)**WS18-6** [10:35] **AirID とプロテオーム解析を活用した細胞・生体におけるタンパク質の近接ワールド**
The proximity world of proteins in cells and living organisms using AirID and proteome analysis

○澤崎 達也 (Tatsuya Sawasaki)

愛媛大・PROS(PROPS, Ehime Univ.)

WS19 B会場 (中ホール) / Room B (Mid-sized Hall)
6月20日 (金) / June 20 (Fri) 15:40 ~ 18:10

Japanese Session

時間タンパク質学：時を生み出すタンパク質分子とその実体
Protein molecules that generate time: what they really are**共催：学術変革領域研究 A「時間タンパク質学：多様な「時」を生み出す タンパク質マシーナリー」**

「時間タンパク質学」とは、周期的な生命現象や一定の経過時間を計るタイマーのような生命現象、それらの背景にある「時を生み出すメカニズム」にタンパク質分子の機能や構造の観点からアプローチする学問領域です。本シンポジウムでは、哺乳類、植物、バクテリア等の計時システムを研究されている第一線の研究者をお招きし、「時を生み出すタンパク質分子」の実体、進化、そして多様性について種横断的な議論を行います。

Chrono-proteinology is a field of studies that approach time-measuring mechanism in organisms from the perspective of functions and structures of protein molecules. In this symposium, we will invite researchers leading the chrono-proteinological studies on mammals, plants, and bacteria. Let's enjoy cross-species discussion on the substance, evolution, and diversity of “protein molecules that generate time”.

オーガナイザー：吉種 光（東京都医学総合研究所）、秋山 修志（自然科学研究機構 分子科学研究所）

Organizers : Hikari Yoshitane (TMIMS), Shuji Akiyama (IMS, NINS)

[15:40] **はじめに**
Opening Remarks

- WS19-1** [15:45] **時間タンパク質学：真核生物が 24 時間をカウントする分子メカニズム**
Chrono-proteinology: Timekeeping Mechanisms for Counting 24 Hours in Eukaryotes
 ○吉種 光 (Hikari Yoshitane)
 都医学研 (TMIMS)
- WS19-2** [16:10] **時計タンパク質の機能進化にみる概日時計の分子起源**
Exploring the origins of circadian clock system through clock protein evolution
 ○向山 厚¹ (Atsushi Mukaiyama)、古池 美彦^{2,3} (Yoshihiko Furuike)、
 伊藤 (三輪) 久美子⁴ (Kumiko Ito-Miwa)、尾上 靖宏² (Yasuhiro Onoue)、堀内 滉太^{2,3} (Kota Horiuchi)、
 近藤 貫太³ (Kanta Kondo)、山下 栄樹⁵ (Eiki Yamashita)、秋山 修志^{2,3} (Shuji Akiyama)
¹ 福井県大・生物資源 (Dept. of Biosci. and Biotech.)、² 分子研 (Inst. for Mol. Sci.)、³ 総研大 (SOKENDAI)、
⁴ 名大院・理 (Grad. School of Sci. Nagoya Univ.)、⁵ 阪大・蛋白研 (Inst. for Protein Res., The Univ. of Osaka)
- WS19-3** [16:28] **古代 KaiC の構造に刻まれた概日リズムの起源**
Structural Origin of Circadian Rhythm in Ancestral KaiC
 ○古池 美彦^{1,2} (Yoshihiko Furuike)、向山 厚³ (Atsushi Mukaiyama)、
 伊藤 (三輪) 久美子^{3,4} (Kumiko Ito-Miwa)、尾上 靖宏¹ (Yasuhiro Onoue)、
 堀内 滉太^{1,2} (Kota Horiuchi)、近藤 貫太² (Kanta Kondo)、山下 栄樹⁵ (Eiki Yamashita)、
 秋山 修志^{1,2} (Shuji Akiyama)
¹ 分子科学研究所 (Institute for Molecular Science)、
² 総合研究大学院大学 (Graduate University for Advanced Studies)、
³ 福井県立大学 (Fukui Prefectural University)、⁴ 名古屋大学 (Nagoya University)、
⁵ 大阪大学蛋白質研究所 (Institute for Protein Research, The Univ. of Osaka)
- WS19-4** [16:45] **PRR5 および TOC1 タンパク質の低温依存的な分解はシロイヌナズナの概日時計における温度補償性に必要である**
Low temperature dependent degradation of PRR5 and TOC1 proteins implements temperature compensation in the Arabidopsis circadian clock
 ○前田 明里 (Akari Maeda)、松尾 宏美 (Hiromi Matsuo)、村中 智明 (Tomoaki Muranaka)、
 中道 範人 (Norihito Nakamichi)
 名大院・生命農 (Grad. Sch. Bio-agric., Nagoya Univ.)
- WS19-5** [17:10] **概日時間を制御する CRY タンパク質に対する化合物を用いた機能調節と構造基盤**
Functional regulation of CRY proteins regulating circadian time with compounds and its structural basis
 ○廣田 毅 (Tsuyoshi Hirota)
 名古屋大・ITbM (ITbM, Nagoya Univ.)
- WS19-6** [17:40] **CaMKII-CaN を介した哺乳類睡眠制御**
Regulation of sleep homeostasis through mammalian CaMKII and Calcineurin
 ○大出 晃士 (Koji Ode)
 東大・院医・システムズ薬理 (Dept. Sys. Pharm., Grad Sch. of Med., The Univ. of Tokyo)
- [18:05] **総合討論**
Discussion

PS- APPA- KPPS-PSSJ joint workshop: Protein Science from classical to latest approaches

Protein science has been developed by a wide range of technologies, including structural biology, biophysics, and so on. Considering the next era of protein science, it is necessary to learn from the past and latest deep technologies and to actively exchange ideas internationally. In this workshop, we are planning to introduce the latest cutting-edge research, which will lead to the development of protein science in the world.

オーガナイザー：李 映昊（韓国基礎科学支援研究院）、奥村 正樹（東北大学）、齋尾 智英（徳島大学）
Organizers : Young-Ho Lee (Korea Basic Science Institute), Masaki Okumura (Tohoku Univ.), Tomohide Saio (Tokushima Univ.)

[15:40] はじめに

Opening Remarks

○李 映昊 (Young-Ho Lee)

韓国基礎科学支援研究院 (Korea Basic Science Institute)

WS20-1 [15:45] Endless Recycling of PET Plastics using PET hydrolases

○Kyung-Jin Kim

Kyungpook National University

WS20-2 [16:20] Mechanisms of alpha-synuclein aggregation and inhibition in Parkinson's disease

○Jean Baum

Department of Chemistry and Chemical Biology, Rutgers University

WS20-3 [16:55] How a dormant, but essential, enzyme in *Pseudomonas aeruginosa* is activated 20,000-fold by a cell-wall

○Kurt L Krause

University of Otago

WS20-4 [17:30] Structural Basis for the pH-Dependent Functional Regulation of the Cytochrome *b₆f* Complex

○栗栖 源嗣 (Genji Kurisu)

阪大・蛋白研 (Inst. Prot. Res., Osaka Univ.)

[18:05] 総合討論

Discussion

計算科学による抗体デザイン

Antibody Design through Computational Science

計算科学を利用した蛋白質の高機能化や改変技術は AI 技術の発達に伴い爆発的に研究が進められています。これは抗体も例外ではなく、抗体設計への応用や抗体成熟機構の理解にも利用されてきています。本ワークショップでは、膨大な配列情報や構造情報を基に in silico 解析で抗体を予測・デザインできる技術について最前線におられる先生方にご講演を頂き、現状の課題について議論したいと思います。

The application of computational science to protein engineering has developed rapidly with the advent of AI technology. Antibodies are no exception and are being used for antibody design and elucidation of antibody maturation mechanisms. This workshop will discuss the latest challenges in antibody prediction and design using in silico analysis.

オーガナイザー：赤澤 陽子（産業技術総合研究所）、松田 知成（京都大学）

Organizers: Yoko Akazawa (AIST), Tomonari Matsuda (Kyoto Univ.)

[15:40] はじめに

Opening Remarks

○赤澤 陽子 (Yoko Akazawa)

産業技術総合研究所 (AIST)

WS21-1 [15:45] 実験屋視点から AI に寄りそった抗体開発

Antibody Development Aligned with AI from an Experimentalist's Perspective

○梅津 光央 (Mitsuo Umetsu)

東北大・院工・バイオ工 (Dep. of Biomol. Eng., Grad. Sch. of Eng., Tohoku Univ.)

WS21-2 [16:14] 蛋白質ドメインを抗原に用いた新型ワクチンモダリティの開発に向けて

Development of a novel vaccine modality using Protein Domains as antigen

○黒田 裕 (Yutaka Kuroda)

農工大・工・生命工 (Dept Biotech Life Sci, TUAT)

WS21-3 [16:43] Computer-aided antibody design: Progress and challenges

○黒田 大祐 (Daisuke Kuroda)

日大・文理・生命 (Dept. of Biosci, Coll. of Hum. Sci., Nihon Univ.)

WS21-4 [17:12] 量子化学計算によるタンパク質間相互作用解析と分子設計

Quantum chemical calculations for protein-protein interaction analysis and molecular design

○福澤 薫 (Kaori Fukuzawa)

阪大・院薬 (Grad Sch. of Pharm. Sci. The Univ. of Osaka)

WS21-5 [17:41] 抗原に依存しない抗体スクリーニング法

Antibody Screening Methods that do not Depend on Antigen

○松田 知成¹ (Tomonari Matsuda)、小林 勇毅¹ (Yuki Kobayashi)、赤澤 陽子² (Yoko Akazawa)、萩原 義久² (Yoshihisa Hagihara)

¹ 京都大学 (Kyoto University)、

² 産業技術総合研究所 (The National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

AI で理解を深める細胞内の情報伝達と機能制御を司る多様な生命分子メカニズム

Understanding of Diverse Bio-molecular regulating molecular mechanisms of signal transduction and enzyme functions by AI methods

AI (機械学習・深層学習) の活用は生命科学研究においても様々な知見を創造している。一方、特に国内に於いては「AI 利用が困難と思われる生命科学研究領域に AI を活用する可能性や革新性」についての議論と認識が十分ではないと思われる。本ワークショップでは多様な生命現象をターゲットとした最先端の AI 研究事例を紹介しながら、AI を駆使する事で生命の根本的理解を深化する試みと将来の可能性に関して議論を深めたい。

AI has been used to create a variety of new scientific knowledge, including in life sciences. However, the "potential and innovation of life sciences using AI" is not sufficiently recognized. We will present cutting-edge AI studies, and deepen our understanding of the use of AI in life sciences.

オーガナイザー: 米澤 康滋 (近畿大学)、土屋 裕子 (産業技術総合研究所)

Organizers: Yasushige Yonezawa (Kindai Univ.), Yuko Tsuchiya (AIST)

[15:40] はじめに Opening Remarks

○米澤 康滋 (Yasushige Yonezawa)

近畿大学 (Kindai Univ.)

WS22-1 [15:45] 深層学習を用いたヘム蛋白質の構造機能相関の解析と立体構造データベースの構築

Analysis of structure-function relationships in heme proteins using deep learning and construction of database of heme-protein structures

○近藤 寛子¹ (Hiroko, X. Kondo)、鷹野 優² (Yu Takano)

¹ 北見工大・工 (Fac of Eng, Kitami Inst Tech.)、² 広島大院・情報 (Grad Sch of Info Sci, Hiroshima City Univ.)

WS22-2 [16:15] Beyond SBDD: 天然化合物から学ぶ AI 創薬

Beyond SBDD: AI-based chemical ligand generation technology learned from natural compounds

○白木 琢磨 (Takuma Shiraki)

近畿大・生物理工 (BOST, Kindai Univ.)

WS22-3 [16:45] MD シミュレーションと深層学習を用いた蛋白質構造変化過程の非線形モーフィング法 MOVE-DM の紹介と応用

Introduction and Application of MOVE-DM, A Nonlinear Morphing Method for Protein Structure Changes using MD Simulation and Deep Learning

○宮下 尚之^{1,2} (Naoyuki Miyashita)

¹ 近大・生物理工 (BOST, Kindai Univ.)、² 近大・院・生物理工 (Grad. Sch. of BOST, Kindai Univ.)

WS22-4 [17:15] AI 機械学習解析と計算科学によるたんぱく質動的特徴の精密解明

Precise Elucidation of Protein Dynamic Features Using AI Machine Learning Analysis and Computational Science

○米澤 康滋 (Yasushige Yonezawa)

近大・先端研 (Ints. of Adv. Tech., Kindai Univ.)

WS22-5 [17:40] 分子動力学シミュレーションと深層学習によるタンパク質アロステリックシグナル伝達機構の解析
Analysis of protein allosteric signal transduction mechanisms using molecular dynamics simulations and deep learning

○土屋 裕子 (Yuko Tsuchiya)

産総研・人工知能研究センター (AIRC, AIST)

[18:05] おわりに Closing

○土屋 裕子 (Yuko Tsuchiya)

産業技術総合研究所 (AIST)