## 2023年度中性子構造生物学研究会「動的構造生物学」

## 開催案内

主催: J-PARC MLF 利用者懇談会、中性子産業利用推進協議会

共催:総合科学研究機構(CROSS)、茨城県中性子利用研究会

協賛:CBI 研究機構量子構造生命科学研究所

1. 開催日時: 2024年3月22日(金)12:30~16:50

2. 開催方法: ZOOM によるオンライン開催

3. 参加費 : 無料

4. 開催趣旨:

2017 年、Cryo-EM 法の開発に貢献した研究者にノーベル賞化学賞が授与されました。これを契機に構造生物学の主役たるタンパク質の構造解析は大きく変容しました。PDB の年別エントリー数をみると、Cryo-EM 法で構造解析されたタンパク質数が X 線による結晶構造解析数に迫る勢いです。また、最近ではタンパク質の構造予測の分野にも革新的な変化が起こり、昨年10月末に発表された最新の AlphaFold (AF) では、PDB に登録されているタンパク質の立体構造データのほぼ全ては最新の AF を使って予測可能で、タンパク質に結合するリガンド分子の構造およびリガンド分子の結合に伴うタンパク質の構造変化も正確に予測できると謳っています。しかしながら、タンパク質の立体構造は決して上記手法で決定されるような静的なものではなく、高度な機能を有するタンパク質ほど動的な揺らぎが大きく、このような擂らぎがタンパク質の高度な機能と密接に関係していることが明らかになってきました。そこで、今回は、このような動的構造生物学の重要性に早くから着目されてこられた講演者の皆さんをお招きし、旧来の静的構造生物学からの進化を目指して、中性子構造生物学研究会「動的構造生物学」を企画しました。できるだけ多くの皆さんにご参加いただき、講演者の皆さんと構造生物学の現状と将来への展望について活発に意見交換していただきますことを心より願っています。

## 5. プログラム:

12:30 はじめに 佐藤 衛(CROSS/横浜市立大学)

司会 杉山 正明(京都大学·複合原子力科学研究所)

12:40–13:40 Jill Trewhella (The University of Sydney)

「AlphaFold predicted protein structures and small-angle neutron & X-ray scattering: insights from an extended examination of selected data in the Small-Angle Scattering Biological Data Bank」 (tentative)

13:40-14:40 山口 秀幸(味の素株式会社 バイオ・ファイン研究所)

「食品素材の動的構造解析-NMRと中性子の協力的活用の試み-」(仮題)

14:40-15:00 休憩

司会 佐藤 衛(CROSS/横浜市立大学)

15:00-16:00 加藤幸一郎(九大・分子システム科学センター)

「MD-FMO 法によるタンパク質ーリガンド間動的相互作用解析」(仮題)

16:00-16:40 佐藤 衛(CROSS/横浜市立大学)

「中性子リテラシー」(仮題)

16:40 おわりに 上村 みどり(生物・生体材料研究会主査、CBI 研究機構量子構造生命科学研究所長)

6. 申込方法: 以下の申込フォームからお申込み下さい。 https://docs.google.com/forms/d/ e/1FAIpQLSfvPfRhnvFA3FeyGR0kG2Hj4HuF5kBPaxHIPfDnY\_6ixtaelQ/viewform

7. 参加申込締切: 2024年3月15日

<問合せ先> 中性子産業利用推進協議会(略称:IUSNA)

〒319-1106 茨城県東海村白方 162-1 いばらき量子ビーム研究センター D201

TEL: 029-352-3934 FAX: 029-352-3935 (火曜日と木曜日のみ勤務)

E-mail: info@j-neutron.com