

ケンブリッジ構造データベース (CSD) および 蛋白質立体構造データベース (PDB) 関連利用セミナー

日 時：2020年1月29日(水)・30日(木)
会 場：大阪大学蛋白質研究所 1階講堂

1月29日(水) ケンブリッジ構造データベース (CSD) 利用セミナー

13:00-13:15	趣旨説明・イントロダクション	栗栖 源嗣 (阪大・蛋白研)
13:15-14:00	CSD-System: ConQuest, Mercury	岡村 高明 (阪大・理) / 藤内 謙光 (阪大・工)
14:00-14:15	Deposit Structures と enCIFer	藤内 謙光 (阪大・工) / 岡村 高明 (阪大・理)
14:15-14:30	休 憩	
14:30-15:00	Mogul & IsoStar (+FIM/SuperStar)	桜井 尋海 (化学情報協会)
15:00-15:45	CSD-Materials と DASH	植草 秀裕 (東工大・理)
15:45-16:15	休 憩	
16:15-17:00	CSD-Discovery	ケンブリッジ結晶学データセンター (CCDC) スタッフ (TV会議による)

17:00-17:15 質問タイム

29日(水)の事前の参加申込は不要です。直接、会場までお越しください。

1月30日(木) PDBj・BINDS ユニット連携講習会「創薬・生命科学における構造データの利用法」

開催趣旨： BINDS の三つのユニットが連携して、タンパク質や化合物の構造データを活用した解析法・化合物スクリーニング法について計算機講習・講演を行います。計算機演習としては、PDB に登録されている化合物 - 蛋白質の複合体立体構造の活用法 (川端)、蛋白質の立体構造比較法 (Rozewicki・Standley)、創薬ターゲットのデータベース (土方・白井) について PC を用いた実習を行います。また、より実践的な化合物探索について、大阪大学での化合物ライブラリのスクリーニング支援活動 (布村・藤井)、並びに計算機による化合物スクリーニング技術 (広川) についての紹介を行います。

プログラム：

10:30-10:35	本講習会の趣旨について	栗栖 源嗣 (阪大・蛋白研)
10:35-12:00	HOMCOS による PDB 内の複合体検索・モデリング	川端 猛 (阪大・蛋白研)
12:00-13:00	休 憩 (昼食)	
13:00-14:00	大阪大学創薬サイエンス研究支援拠点における BINDS 支援	布村 一人 (阪大・薬・附属化合物ライブラリー) 藤井 晋太郎 (阪大・薬・附属創薬センター) 広川 貴次 (産総研・創薬分子プロファイリングセンター)
14:05-15:05	インシリコスクリーニングによる医薬品候補化合物の探索	John Rozewicki / Daron Standley (阪大・微研)
15:05-15:25	休 憩	
15:25-16:25	Application of structural alignment in immunology	土方 敦司 / 白井 剛 (長浜バイオ大)
16:30-17:30	Drug Target Excavator (DTX) による創薬ターゲット探索	
17:35-18:00	個別相談	

定 員：40名程度

申込webサイト：<https://pdbj.org/news/workshop20200130>

参加申込締切：2020年1月28日(火)

計 算 機： 原則として各自でノート PC を持参していただくようお願いいたします。無線 LAN が使用できる PC であれば OS は Windows でも Mac でもかまいません。また、阪大で保有する Windows PC の貸し出しも行いますので、希望される方は、参加申し込みの際にお知らせください。なお、貸出用 PC の数には限りがあります。希望者が多い場合は先着順とさせていただきます。

【オーガナイザー】 栗栖 源嗣 (阪大・蛋白研)、川端 猛 (阪大・蛋白研)

【主 催】 大阪大学蛋白質研究所 (29・30日) 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (BINDS) (30日)

【連絡先】 1月29日について 栗栖 源嗣 Email: gkurisu@protein.osaka-u.ac.jp
1月30日について 川端 猛 Email: kawabata@protein.osaka-u.ac.jp
〒565-0871 吹田市山田丘3-2 大阪大学 蛋白質研究所
Tel: 06-6879-4311

参加費無料