

# 抗体の立体構造予測と 今後の進展

開催日時：2021年2月18日（木）10時30分～12時

セミナー形式：Zoom（定員90名、JBAwebページにて受付）

主催：（一財）バイオインダストリー協会 創薬モダリティ基盤研究会

講師：**市原 収氏**  
（シュレーディングー株式会社）



効率的な創薬を進めるためには、分子モデリングソフトウェアを活用した創薬が重要であることについては疑う余地のない時代となって久しい。昨年末には、タンパク質構造予測コンペで、AI活用したシステムが、更なる進展を遂げたというニュースが入るなど、ますます技術革新が進んでいる様子が伝わる。今後の抗体創薬を進めるためには、スクリーニング実験と、これらの技術をどのように組み合わせれば、より効率的に適切な候補分子に到達できるのかについて、学ぶ機会を設けた。

シュレーディング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と機械学習を組み合わせることで、高度なタンパク質立体構造情報に基づく薬物設計（Structure Based Drug Design）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る。今回、市原氏に講演頂き、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、最先端の技術を活用することで、今後の抗体スクリーニング・抗体創薬が、どのように展開していくのかについて考えたい。

**Zoom参加：JBAホームページよりお申し込みください。**

**締切：2021年2月16日（火）12時**

**お問合せ：（一財）バイオインダストリー協会  
（担当：渡邊、岸本、橋本、矢田）**