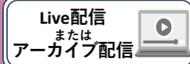


タンパク質吸着制御への シミュレーション・機械学習の活用法



～膜・フィルター・生体材料への応用事例～

- 日 時: 2025年4月10日(木) 10:00～16:00 ●聴講料: 1名につき 55,000円(消費税込、資料付)
- 会 場: Zoomを使用したLive配信 ※Live配信から [1社2名以上同時申込の場合のみ1名につき49,500円(税込)]
7営業日後を目安にアーカイブ配信いたします。 [大学、公的機関、医療機関の方には割引制度(アカデミック価格)があります。]

1. タンパク質吸着という複雑な現象を 分子シミュレーションで「解きほぐす」 ～高分子バイオマテリアルや浄水膜を例に～

【10:00-12:00】
名古屋工業大学 大学院工学研究科 あ工学専攻
生命・物質化学プログラム/カーボンニュートラルプログラム
准教授 南雲 亮 氏

【講座趣旨】浄水膜やバイオマテリアルの材料開発において、タンパク質の材料表面への吸着は、高度に制御すべき重要課題である。しかし、溶液中を漂うタンパク質の立体構造は3次元のかつダイナミックに変化するため、詳しい吸着メカニズムを解析するには多大な労力を伴う。
そこで講演者らは、タンパク質と材料表面の原子間力が実質的に1～2ナノメートル程度の極めて微小な領域内でのみ作用する事実に着目した。これを踏まえ分子シミュレーションを利用すれば、タンパク質吸着抑制の可否を簡便に判定できる可能性を見出した。
本講演の前半では、タンパク質吸着抑制の可否を判定する方法論を紹介する。後半では、この判定法をろ過膜や高分子バイオマテリアルなどの様々なポリマー材料に適用した具体的事例について言及する。また「中間水」や「自由水」など、タンパク質や材料表面を取り囲んでいる水分子の役割についても私見を述べたい。「複雑怪奇」とも言える材料表面へのタンパク質吸着現象ではあるが、吸着抑制の有無を判定するというただ1点に的を絞ることで、効率的で見通しのよい材料設計が期待できることを紹介したい。

- タンパク質吸着制御の現状
 - 高分子バイオマテリアルの場合
 - 浄水膜の場合
 - 水の役割とは何か？
- 分子シミュレーションとタンパク質吸着
 - シミュレーションで分かること
 - これまでのシミュレーション活用事例
- タンパク質吸着抑制の可否を判定する方法論
 - 分子シミュレーションを活用するメリットと課題
 - 吸着抑制を判定する方法論とコンセプト
- 吸着抑制法の具体的な応用事例
 - 双性イオン性マテリアル
 - ポリ(2-ヒドロキシエチルメタクリレート)
 - ポリ(2-メトキシエチルアクリレート)
 - 浄水膜材料
 - シリカ系材料
- 今後の展望

【質疑応答】

2. 吸着・接着を決める界面相互作用の理解と 機械学習を用いた材料設計

【13:00-16:00】
東京科学大学 物質理工学院 材料系 准教授 林 智広 氏

【講座趣旨】本セミナーでは、有機物・セラミクス・金属などの材料と生体分子・細胞・微生物がどの様に相互作用するか、分子レベルでの解釈から、巨視的に観察される現象までを俯瞰して議論し、材料設計にフィードバックするための知見を得るための方法論を議論します。そのために、界面相互作用の基礎的理解、界面の測定手法の原理と測定結果の解析を実際の例を元に解説します。また、後半では情報科学の手法(機械学習・多変量解析など)を用いた材料のスクリーニング、材料設計に関して解説します。研究開発に情報科学的な手法を導入する際、一体どこから手を付ければ良いのか?その手法の選択・データベースの構築などに関して解説します。

- 生体材料表面の解析に用いられる分析手法
 - ～表面・界面解析手法の基本を抑える
 - 1)様々な表面分析手法とその特徴
 - 2)水中でのバイオマテリアルの解析
 - ～真空中との物質間の相互作用の違いを理解する
 - 3)原子間力顕微鏡(AFM)を用いた計測
 - 4)その他、表面・界面科学の分析手法を用いた計測
 - 5)有機物表面の構築
- (研究事例)抗タンパク質吸着・抗細胞接着特性を持つ表面解析
 - 1)タンパク質吸着・細胞接着を決定する界面相互作用
 - 2)付着性表面・抗付着性表面が引き起こす界面相互作用
 - 3)界面における水分子の振るまいと抗付着性の関係
 - 4)分子夾雑状態におけるバイオ界面・界面における微生物の振る舞いの解析
- (研究事例)情報科学の手法を用いた自己組織化単分子膜・高分子薄膜の設計
 - 1)情報科学を用いた単分子膜表面へのタンパク質吸着量の子測
 - 2)情報科学を用いた高分子薄膜の設計
 - 3)機械学習を用いた生体分子表面の構造ルールの抽出
- 情報科学的手法の導入に関して
 - 1)準備するもの ～一体どこからはじめれば良いのか
 - 2)YouTUBEを用いた情報収集と生成AI(ChatGPTなど)を用いた効率的プログラミング

【質疑応答】

「タンパク質吸着制御」セミナー申込書

(Live配信/アーカイブ配信 下記のいずれかに☑を入れてください)

- Live配信 (No.504111) 開催日: 4/10
- アーカイブ配信 (No.504163) 配信期間: 4/22～5/2

・申込書に必要な事項をご記入の上、FAX (03-5436-7745) にてお申込みください。
・ホームページからも申込できます。 <https://www.gijutu.co.jp/>

会社名	事業所・事業部		
住所	〒		
TEL	FAX		
	所属部課	氏名(フリガナ)	E-mail
受講者1			
受講者2			
今後ご希望しない案内方法に×印をしてください(現在案内が届いている方も再度ご指示ください) [郵送(宅配便)・FAX・e-mail]			
個人情報の利用目的			
・セミナーの受付、事務処理、アフターサービスのため		・今後の新商品、新サービスに関するご案内のため	
・セミナー開催、運営のため講師へもお知らせいたします			

●申込方法

1. 申込書が届き次第、請求書・聴講券・会場案内図をお送りいたします。
2. お申し込み後はキャンセルできません。
受講料は返金いたしませんので、ご都合の悪い場合は代理の方がご出席ください。

3. 申込み人数が開催人数に満たない場合等、状況により中止させて頂く場合がございます。
4. 定員になり次第、申込みは締切となります