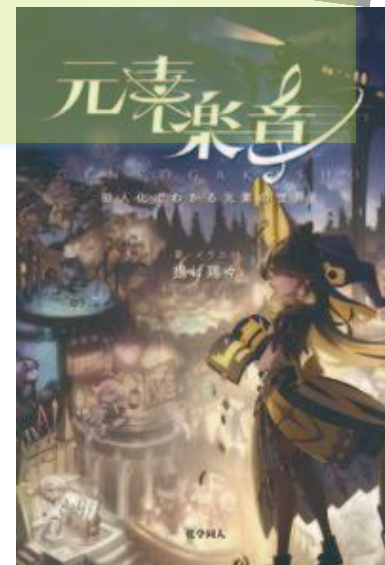
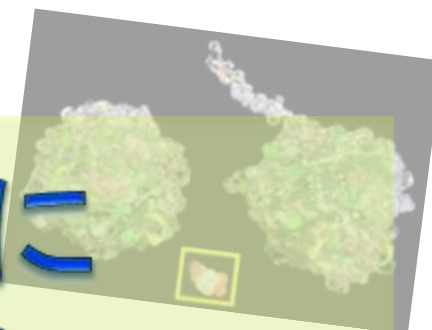
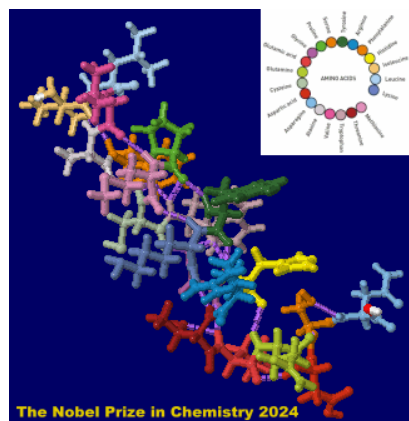
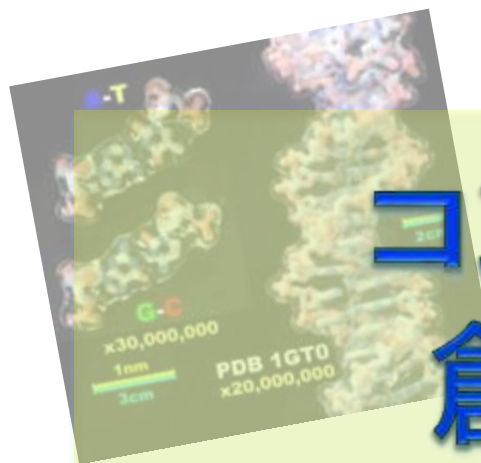


コンピュータと共に 創る未来の化学



http://www.ecosci.jp/sccj_sa2024/

<https://sites.google.com/view/sccj2024publicevent/>

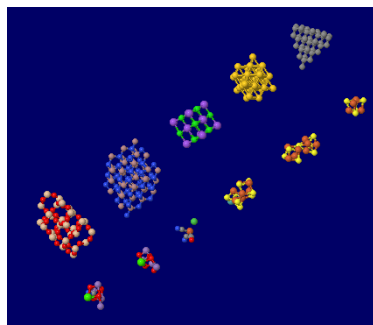
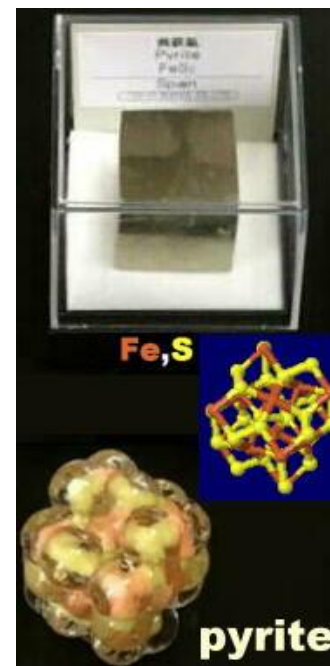
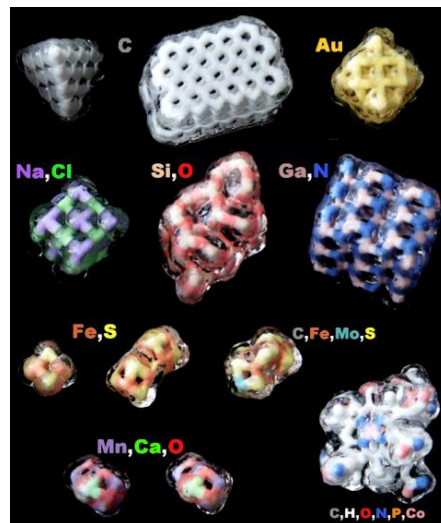
本間善夫(ecosci.jp)

日本コンピュータ化学会@サイエンスアゴラ2024(2024/10/26-27)

日本コンピュータ化学会2024年秋季年会公開イベント(室蘭市, 2024/10/19)

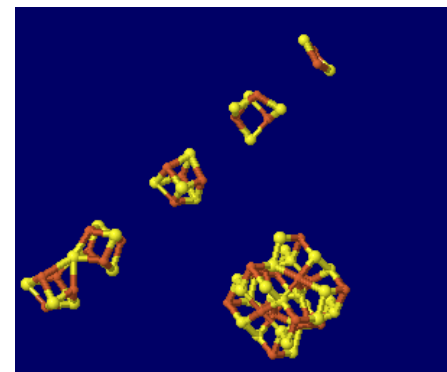
➤ 模型製作: スタジオミダス <http://studio-midas.com/>

“触る”科学の魅力；川上モデル以外の模型も展示



**Jmol形式分子は
Microsoft Edgeで
Internet Explorer
モードにして閲覧可能**

Figure 1: Periodic table of elements showing the distribution of elements in the periodic table. The table is color-coded by groups: 1 (purple), 2 (blue), 3-10 (green), 11-18 (yellow), 19-20 (orange), 21-28 (red), 29-36 (pink), 37-54 (light blue), 55-86 (light green), 87-118 (light purple). The elements are arranged in rows and columns, with the first row containing H and He, and the last row containing Fr and Og. The table is labeled with 'H' at the top left and 'He' at the top right. The bottom left is labeled '(A)' and the bottom right is labeled '(B)'.



http://www.ecosci.jp/km/km_ligand.html
<http://www.ecosci.jp/chem18/crystal2014.html>

Ile	Leu	Val	Ala	Phe	Pro	Met	Cys	Trp	Tyr	Lys	Gly	His	Arg	Thr	Glu	Gln	Asp	Ser	Asn

◆画期的3Dプリンタ模型, 川上モデル “触る”科学の魅力; 川上モデル以外の模型も展示

◆ ecosci.jp 出前講座のご案内 ◆

～ 動くバーチャル分子で学ぶ生体分子, 環境問題 & 科学技術と社会, そしてビッグヒストリー ～



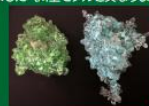
TOPIC



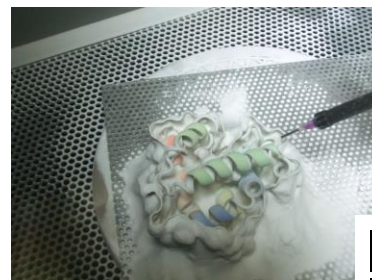
3Dプリンタによる新注体分子模型Kawakami Model (『生物物理』最新号版 [PDF])
 左から: GPCR例 ロドプシンPDB 3PQR | 光合成反応3ARCのChain A | ヘモグロビン2HHB | Oct1/Sox2/DNA 複合体1GT0 | リガンドだけ模型 | 鍵と鍵穴
 ※ヘモグロビンについては共著者の数冊出版「チャート式 新化学 化学基礎・化学」, ブルーバックス「動く分子事典」にも掲載。
 ※Kawakami Modelの発注・問い合わせは現在共同開発者のスタジオミダスが窓口になっています。
 ※発注時のデータはPyMOLで作成できます。→ 解説ページ例: BioKids Wiki, Windowsで行こう
 ※PyMOLについては「見てわかる構造生命科学」(化学同人)でも解説されています(図解・アニメーション動画版サイト)。
 ※2014/07/15のJavaアップデートでJmol分子が表示されない場合はこちらを参考にアップデートファイルを再降。
 (この方法は自己責任でお願いいたします; アップデート版への対応検討中)

□

★スタジオミダスによりAlphaFold/AlphaFold2関連模型を製作していただきました(川上モデルと異なります)。シトクロムP450 3A4構造PDB 2VOMとUniProt accession P08684です。



<http://www.ecosci.jp/m/>



スタジオミダス提供の
分子模型製作中の写真

<http://www.tkd-pbl.com/book/b146076.html>

●川上勝, 生物物理 55, 104-107 (2015)
https://www.jstage.jst.go.jp/article/biophys/55/2/55_104/_pdf

生物物理 55 (2), 104-107 (2015)
 DOI: 10.2142/biophys.55.104
 発刊日: 2014 年 12 月 24 日

理論/実験 技術

3Dプリンターを用いたタンパク質分子模型の製作とその利用

川上 勝

山形大学工学部ライフ・3Dプリンティベーション創成センター

1. 再び注目された分子模型

分子模型は, 手元で分子の構造を触りながらじっくりと, 直観的に理解することができる優れたツールである。特に有機化学では経験的に模型が使われている。生物物理学/構造生物学の分野でも, Watson と Crick が大きな DNA を自作して DNA の構造モデルに用いたり, Perutz と Kendrew はタンパク質の立体模型を沢山作り, 研究成果の発信に積極的に用いたりしていた。しかしほとんどの場合, 分子数数千以上のタンパク質分子の模型を製作すると, 部品を組み立てるのに骨が折れるうえに, 出来上がった巨大な模型を「手にして」議論することは, 現実的ではなく, タンパク質の分子模型と言えば, 大きなケース内に収められた展示物という認識であった。ところが, この状況が, 3D プリンターの出現によって, 大きく変わろうとしている。3D プリンターを用いれば, タンパク質の複雑な立体構造をいとも簡単に造形できる。実はかなり早業から 3D プリンターを用いた模型製作の提案がなされてきた。特に近年, フルカラー式 3D プリンターの普及が進み, 世界中の研究施設において, 3D プリンターによるタンパク質やウイルス, 微生物の模型製作が導入されるようになってきている。民間の模型製作サービスも登場し, タンパク質の分子模型は, 徐々に研究や教育の現場に導入されつつある。

2. 透明で柔軟なタンパク質分子模型

ここで簡単に 3D プリンターの造形法について述べると, その代表的な手法として, 光造形, 粉末造形, 選択的レーザー焼結, そして熱溶解型 (FDM) がある。どの手法も, 作りたい物体の 3D データから, Z 軸に沿って 100μm の「断面図」データを用意し (CT や MRI の輪切り画像のようなものを想像して欲しい), 断面図データに従って, 一枚一枚, 平面状に「印刷」をし, これを組み重ねてゆく方式をとっている。3D

プリンターの最も特徴的な点は, 印刷をずから積み上げてゆく手法であるため, 「入れ子」構造であるうが, 細かい可動部を持った機械部品であらうが, 血管や神経のような生物が作り出す複雑な形状であらうが「一括で」造形できる点にある (空中に浮いたような部分の印刷は, ヤコーニ構造を一緒に造形し, 後から溶解や破壊除去する)。使用できる素材の種類も多様なプラスチック, ゴム等の樹脂, 金属, ギャル, 細胞など飛躍的に増えてきている。

しかし分子模型に関して言えば, 現在の 3D プリンター技術を用いて作られた模型は, 石膏や色のつかない樹脂製であるため, 表現できる構造が制限され, また物性情報に乏しかった。とりわけ物理的に使いために, 模型の最も有用な「自由に手に持って形を理解する」点で十分であった。筆者は 2008 年に, これまでにない新しいタンパク質分子模型の概念を提案し, この開発を 3D 造形会社 (スタジオミダス社: 埼玉県上尾市) と共同で進めた。2009 年には製造法の特許¹を申請し, 2012 年には望みどおりの性能を持った模型製作技術が確立でき, この製法を論文²として発表した。製作の機構を図 1 に示す。まず, タンパク質分子構造アフトを用いて, 対象タンパク質分子の主鎖構造を任意のカラーリング, 表示形式で描出する。必要であれば重要な側鎖も描出しておく。さらに, 分子表面構造のデータも同時に描出し, これらを VRML (Virtual Reality Modeling Language) 形式で出力する。この出力ファイルを, CAD (Computer Aided Design) 編集



図 1 新しいタンパク質分子模型 (川上モデル) の製作過程の概略。 (文庫 3 より改定, 転載)

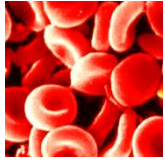
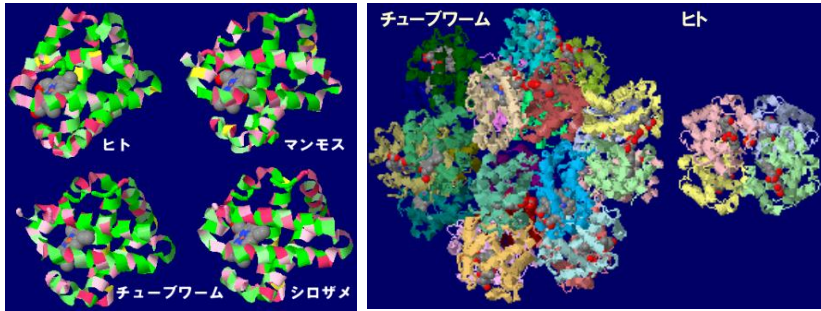
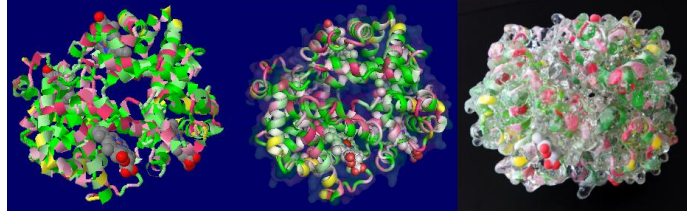
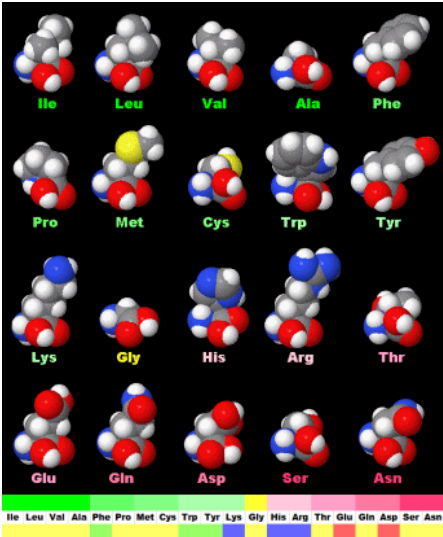
Protein Molecular Models by 3D Printing
 Midara KAWAKAMI
 Life-3D Printing Innovation Center (L3PIC), Yamagata University



●川上モデル製作:スタジオミダス
<http://studio-midas.com/bunshi/>

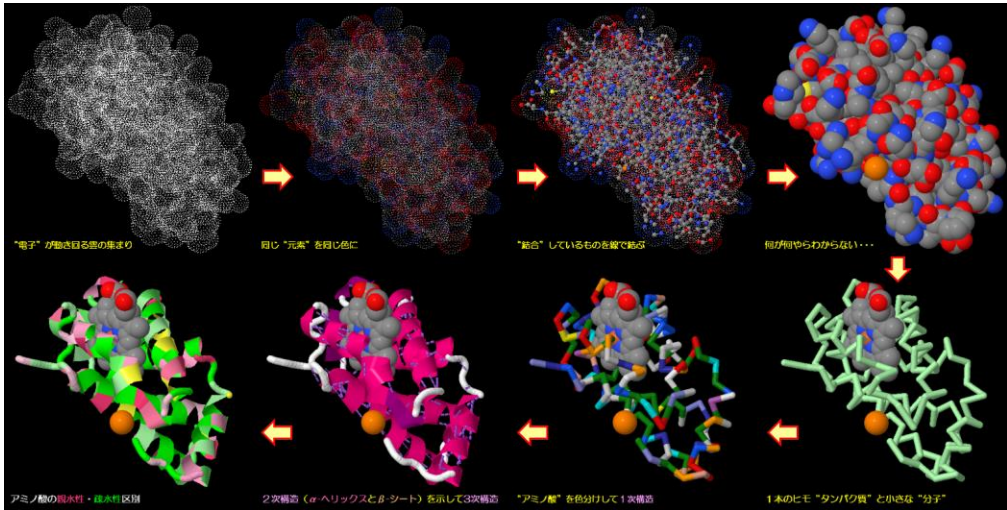
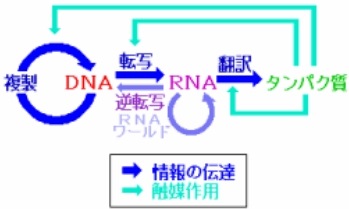
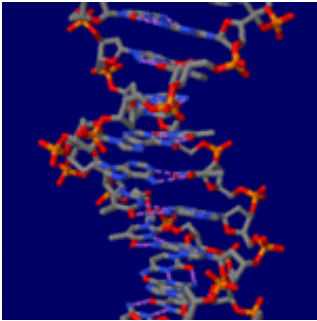
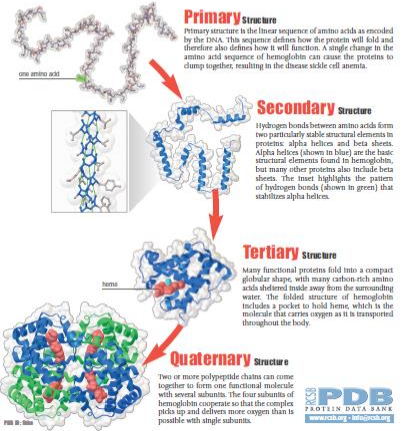
Ile	Leu	Val	Ala	Phe	Pro	Met	Cys	Trp	Tyr	Lys	Gly	His	Arg	Thr	Glu	Gln	Asp	Ser	Asn

◆水に溶ける？ 溶けない？ タンパク質の1次構造～4次構造 ヘモグロ빈を例に



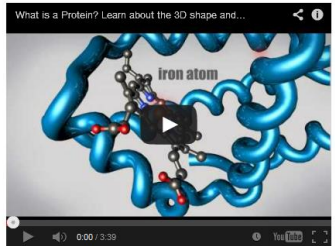
What is a Protein?

Proteins play countless roles throughout the biological world, from catalyzing chemical reactions to building the structures of all living things. Despite this wide range of functions all proteins are made out of the same twenty amino acids, but combined in different ways. The way these twenty amino acids are arranged dictates the folding of the proteins into its unique final shape. Since protein function is based on the ability to recognize and bind to specific molecules, having the correct shape is critical for proteins to do their jobs correctly.



RCSB PDB

<http://www.pdb.org/pdb/>

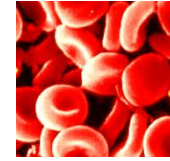


参考: What is a Protein? Learn about the 3D shape and function of macromolecules - YouTube

<http://www.youtube.com/watch?v=qBRFIMcxZNM>

http://www.ecosci.jp/pdb/hemoglobin_s.html

◆水に溶ける？ 溶けない？ タンパク質の1次構造～4次構造 ヘモグロビンを例に



What is a Protein?

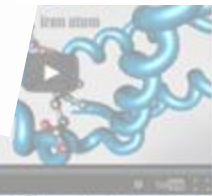
Proteins play countless roles throughout the biological world, from catalyzing chemical reactions to building the structures of all living things. Despite this wide range of functions all proteins are made out of the same twenty amino acids, but combined in different ways. The way these twenty amino acids are arranged dictates the folding of the protein into its unique final shape. Since protein function is based on the ability to recognize and bind to specific molecules, having the correct shape is critical for proteins to do their jobs correctly.

Adary Structure

onds between amino acids form
larly stable structural elements in
alpha helices and beta sheets.
ices (shown in blue) are the basic
elements found in hemoglobin.
y other proteins also include beta
The inset highlights the pattern
ogen bonds (shown in green) that
as alpha helices.

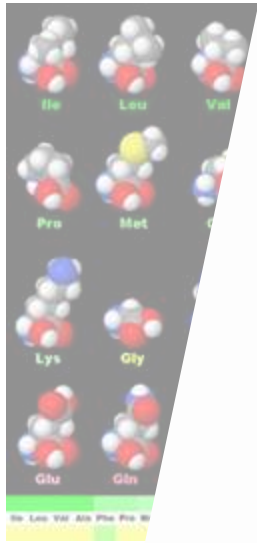
tiary Structure

functional proteins fold into a compact ball shape, with many carbon-rich amino acids sheltered inside away from the surrounding water. The folded structure of hemoglobin creates a pocket to hold heme, which is the molecule that carries oxygen as it is transported throughout the body.



<http://www.youtube.com/watch?v=qBRFIMcxZNM>

http://www.ecosci.jp/pdb/hemoglobin_s.html



[左] デオキシヘモグロビン2hhbのChain Aのアミノ酸配列とリガンドHEM (赤四角) を選んでAlphaFold3構造計算

[右] 2hhbのChain Aと得られたAlphaFold3構造例 (model 0) のPyMOLによる重ね合わせ

2024年ノーベル化学賞はAlphaFold/Alpha

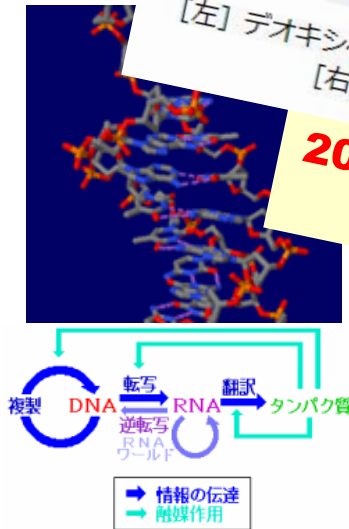
<http://www.ecosci.in>

AlphaFold3構造例 (model 0) のPyMOLによる重ね合わせ

PDB 2HHB (Chain A)

AlphaFold 3

2024年ノーベル化学賞はAlphaFold/AlphaFold2 #AI
<http://www.ecosci.jp/AF/#nobel2024>



Ile	Leu	Val	Ala	Phe	Pro	Met	Cys	Trp	Tyr	Lys	Gly	His	Arg	Thr	Glu	Gln	Asp	Ser	Asn

◆水に溶ける? 溶けない?

“水と油”で見る**20種類**のアミノ酸; 展示**3D**プリンタ模型
 (“鍵と鍵穴”模型も)のアミノ酸着色

アミノ酸			特性基 R			hydropathy index	極性%	log P	酸性・塩基性	極性・非極性	Cleftの分類	等電点	必須・非必須 (ヒト)
			O	I	I/O								
Ile	I	イソロイシン	80	0	0	4.5	5.2	-1.70	中性	非極性 (疎水性)	Aliphatic	6.02	必須
Leu	L	ロイシン	70	0	0	3.8	4.9	-1.52	中性	非極性 (疎水性)	Aliphatic	5.98	必須
Val	V	バリン	50	0	0	4.2	5.9	-2.26	中性	非極性 (疎水性)	Aliphatic	5.96	必須
Ala	A	アラニン	20	0	0	1.8	8.1	-2.85	中性	非極性 (疎水性)	Aliphatic	6.00	非必須
Phe	F	フェニルアラニン	140	15	0.107	2.8	5.2	-1.38	中性	非極性 (疎水性)	Aromatic	5.48	必須
Pro	P	プロリン	60	10	0.167	-1.6	8.0	-2.54	中性	非極性 (疎水性)	Pro & Gly	6.30	非必須
Met	M	メチオニン	100	20	0.200	1.9	5.7	-1.87	中性	非極性 (疎水性)	Aliphatic	5.74	必須
Cys	C	システイン	60	20	0.333	2.5	5.5	-2.49	中性	極性 (中性)	Cysteine	5.07	非必須
Trp	W	トリプトファン	180	130	0.722	-0.9	5.4	-1.05	中性	非極性 (疎水性)	Aromatic	5.89	必須
Tyr	Y	チロシン	140	115	0.821	-1.3	6.2	-2.26	中性	極性 (中性)	Aromatic	5.66	非必須
Lys	K	リシン	80	70	0.875	-3.9	11.3	-3.05	塩基性	極性 (塩基性)	Positive	9.74	必須
Gly	G	グリシン	0	0	-	-0.4	9.0	-3.21	中性	非極性 (疎水性)	Pro & Gly	5.97	非必須
His	H	ヒスチジン	80	152	1.900	-3.2	10.4	-3.32	塩基性	極性 (塩基性)	Positive	7.59	必須
Arg	R	アルギニン	80	190	2.375	-4.5	10.5	-4.20	塩基性	極性 (塩基性)	Positive	10.76	準必須
Thr	T	トレオニン	40	100	2.500	-0.7	8.6	-2.94	中性	極性 (中性)	Neutral	6.16	必須
Glu	E	グルタミン酸	60	150	2.500	-3.5	12.3	-3.69	酸性	極性 (酸性)	Negative	3.22	非必須
Gln	Q	グルタミン	60	200	3.333	-3.5	10.5	-3.64	中性	極性 (中性)	Neutral	5.65	非必須
Asp	D	アスパラギン酸	40	150	3.750	-3.5	13.0	-3.89	酸性	極性 (酸性)	Negative	2.77	非必須
Ser	S	セリン	20	100	5.000	-0.8	9.2	-3.07	中性	極性 (中性)	Neutral	5.68	非必須
Asn	N	アスパラギン	40	200	5.000	-3.5	11.6	-3.82	中性	極性 (中性)	Neutral	5.41	非必須

<http://www.ecosci.jp/amino/amino2j.html>



◆有機概念図発祥の地＝熊本大学薬学部

有機概念図の発祥の地＝熊本

Faculty of Pharmaceutical Sciences, Kumamoto University



藤田 穆 先生の略歴

日本薬学会名誉会員薬学博士 藤田 穆先生は大正十三年私立九州薬学専門学校(本学)の教授に招かれ、昭和十七年官立移管後の第三代熊本薬学専門学校校長を拝命。昭和二十年七月の熊本大空襲にて灰燼と化した熊本の復興、さらに教育研究環境の整備充実に血を流し努力を払い現在の揺るぎなき基盤を築く。昭和二十四年熊本大学初代薬学部部長に就任、昭和三十五年定年。後、請われて第一薬科大学新設に参画、学長として教学・経営に貢献。その間、日本薬学会副会頭等要職にあつて薬学の発展に尽瘁、その功により昭和四十五年勲二等に叙せられる。翌年四月七十六才で逝去。先生は若き日ドイツ留学中に発想、帰国後、完成の独創的「有機概念図」を発表、研究者として化学界に万丈の光をはく。熊薬百周年記念事業実行にあたり同窓生一同、先生の御偉功を稱えて尊像を謹製し余徳を俾ふ。先生の徳と業、今に及んで愈々光を放ち此の尊像と共に永に朽ちざるものならん。

(昭和六十年十一月吉日、熊薬百周年事業会会長、薬学部部長 久野拓道 謹記より転記)

概要

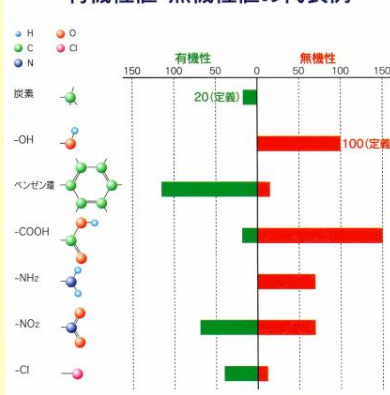
『有機概念図は有機化合物の性状を、主として炭素数に基づく有機性(共有結合性)と、置換基の性質、傾向に基づく無機性(イオン結合性)に分け、有機化合物を有機軸と無機軸と名づけた直交座標上に位置させて、その性質の概要を理解せようとしたもの』であり、熊本大学薬学部 藤田 穆 教授により発想され、一つの学問体系として確立された。この学問体系は、昭和5年発行の藤田 穆著「有機分析」(カニヤ書店)にまとめられている。有機概念図は、その後、藤田 穆 教授の愛弟子で、本学出身の赤塚政実教授によりさらに発展され、その成果を含めて、1974年には「系統的有機定性分析(混合物編)」(藤田 穆・赤塚政実著、風間書房)として出版され、多くの研究者に引用されてきた。本有機概念図の発想、確立等のために、熊薬はわが国における有機分析の発祥の地と呼ばれることもある。

今なお医薬品、化粧品を始め広範な分野において、多数の化合物を対象にして、その構造からさまざまな物性(化合物の性質)を知るために利用されている。つまり、分析することなしに、化学構造から物質の顔(外観、臭い、物性など)を極めて簡便にかつ迅速に知る唯一の手段である。逆に、物質の顔から分子量や構造を推測することも可能である。

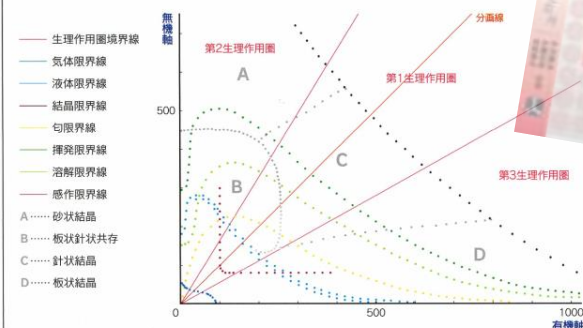
原理

有機化合物の炭素と置換基に与えられている有機性・無機性という数値を用いて、当該分子の構造から有機性値と無機性値の総和を求め、その様々な性質(沸点、溶解性、生理活性、有害性、log P値[Pは水-オクタノール分配係数]など)を推定するものである。

有機性値・無機性値の代表例



藤田先生の考えに基づいた有機概念図の最新版



揮発限界線…………この圏内の化合物は低温(室温前後)で揮発する性質を有している可能性がある。
※例えば、シックハウスの原因物質は揮発性であり、シックハウスで取り上げられる化合物は、ほとんどこの範囲に収まっている。さらに、香り分子は、揮発限界線の内側の均相限界線の中に入っている。

第1生理作用圏…薬理作用が最もあらわれやすい。医薬品はここに含まれるものが多く、食品の多くはここには入っていない。

第2生理作用圏…それぞれ個性が強く、反応性が高く分解もしやすい。食品では、三大栄養素の糖類とタンパク質がここに含まれ、水溶性ビタミンもここに入る。アミノ酸のフェニルアラニンとトリプトファンだけは第1生理作用圏に入っている。

第3生理作用圏…代謝が遅く、副作用も慢性的なものが多い。食品では三大栄養素の脂肪や脂溶性ビタミンが含まれる。難分解性・濃縮性化合物(環境ホルモンとして疑われている化合物など)もここに入る。

感作限界線…………農業による接触皮膚炎の起炎物質の範囲として定められた。

(三共出版「有機概念図」から引用し、一部改変)

<http://www.sankyo-shuppan.co.jp/detail.php?id=310>



◎Kawakami Model(“鍵と鍵穴”模型も)ではタンパク質中のアミノ酸を有機概念図の無機性・有機性の比(特性基のI/O値)に基づいて着色しています。

<http://www.ecosci.jp/ocd/>

◆有機概念図発祥の地＝熊本大学薬学部

有機概念図の発祥の地＝熊薬

Faculty of Pharmaceutical Sciences, Kumamoto University

藤田 穆 先生の略歴

日本薬学会名誉会員薬学博士 藤田 穆先生は大正十二年私立九州薬学専門学校(本学)の教授に招かれ、昭和十七年官立移管後の第三代熊本薬学専門学校校長を拝命。昭和二十年七月の熊本大空襲にて灰燼と化した熊本の復興、さらに教育研究環境の整備充実に際し多大な努力を払い現在のほぐきな基盤を築く。昭和二十四年熊本大学初代薬学部部長に就任。昭和三十三年定年。退、請われて第一薬科大学新設に参画、学長として教学・経営に貢献。その間、日本薬学会副会頭の要職に充てられ薬学の発展に尽力。その功により昭和四十五年勲二等に叙せられる。翌年四月七十六才で逝去。先生は若き日ドイツ留学中に発想、帰国後、独自の「有機概念図」を発表、研究者として化学界に下すの気には、熊産百周年記念事業行なうに一同参加。一生の御伽伽を揃えて尊像を彫製し、余徳を偲び、先生の徳と志、今に及び、愈々次々留めたる此の尊像と共に永く光輝するものならん。

(昭和六十年十一月吉日、熊鷹百周年事業會會長、藏學部長、久野拓造、謹記)

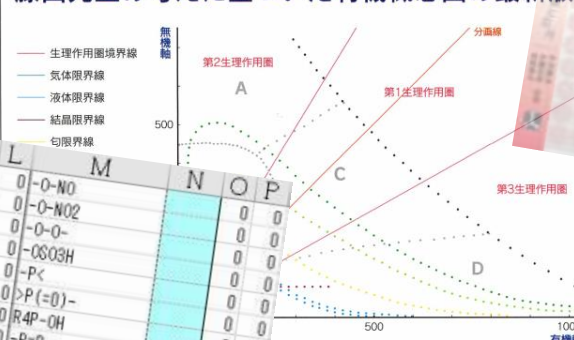
概要

原理

有機化合物の性状を、主として置換基の				有機化合物の炭素と置換基に与えられている 有機性・無機性という数値を用いて、当該分子の 有機性値と無機性値の総和を求め、有害性						
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1 C (すべての炭素)				0	0	-Br				
2 二重結合				0	0	-Cl				
3 三重結合				0	0	-CN				
4 Iso分枝(末端)				0	0	>C=NH	0	0	>H ₂ (共有結合)	
5 Tert分枝(末端)				0	0	>C=O	0	0	0	-I
6 ベンゼン核(単環)				0	0	-CONH- *	0	0	0	-N< (アミン)
7 ナフタレン核、キノリン核				0	0	-CONH-CO- *	0	0	0	-NC
8 アントラセン核				0	0	-CONH-CONH-	0	0	0	-NCO
9 フェナントレン核				0	0	-CONH-CONH-CO-	0	0	0	-NCS
10 環(非芳香性単環)				0	0	-CO-O-CO-	0	0	0	-NH-CONH- *
11 ラクトン環				0	0	-COOH	0	0	0	-NH-NH-
12 軽金属(塩)				0	0	-COO ϕ	0	0	0	-NH-SO ₂ -NH-
13 重金属(塩)				0	0	-COSH	0	0	0	-N=N-
14 アミン塩、アンモニウム塩				0	0	-COO ϕ	0	0	0	=N-NH- *
15 -As<				0	0	-COSSH	0	0	0	-N=N-NH ₂
16 -As=As-				0	0	-CSNH- *	0	0	0	-NO
17 R4As-OH				0	0	-CSOH	0	0	0	-NO ₂
18 -AsO ₃ H ₂ , >AsO ₂ H				0	0	-CSO ϕ	0	0	0	>N $\rightarrow$ O
19 -Bi<				0	0	-CSSH	0	0	0	=N-OH
20 R4Bi-OH				0	0	-CSS ϕ	0	0	0	=>N+ -OH
				0	0	-F (甲田による)	0	0	0	-O-
							0	0	0	-[CH ₂ CH ₂ -O]-
							0	0	0	-OH

さまざまな物性(化合物の性状)を
 表している。つまり、分析することなしに、化学構
 造から物質の顔(外観、臭い、物性など)を極めて
 簡便にかつ迅速に知る唯一の手段である。逆に、
 物質の顔から分子量や構造を推測することも可
 能である。

藤田先生の考えに基づいた有機概念図の最新版



は低温(室温前後)で揮発する性質を有している原因物質は揮発性であり、シックハウスで取り上げられる化合物に収まっている。さらに、香り分子は、揮発限界線の内側の匂源にあわれやすい。医薬品はここに含まれるものではなくここには入っていない。強く、反応性が高く分解もしやすい。食品では、類とタンパク質がここに含まれ、水溶性ビタミン/酸のフェニアラニンとトリプトファン作用圏に入っている。使用も慢性的なものが多い。食品では三大栄養素(炭水化物)が含まれる。難分解性、濃縮性化合物(環状に凝わっている化合物など)もここに入る。皮膚炎の起始物質の概観として定められた。

(三共出版「有機権図」から引用し、一部改変)

<http://www.sankyoshuppan.co.jp/detail.php?id=310>



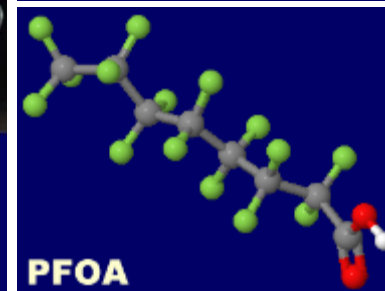
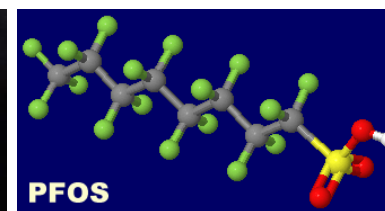
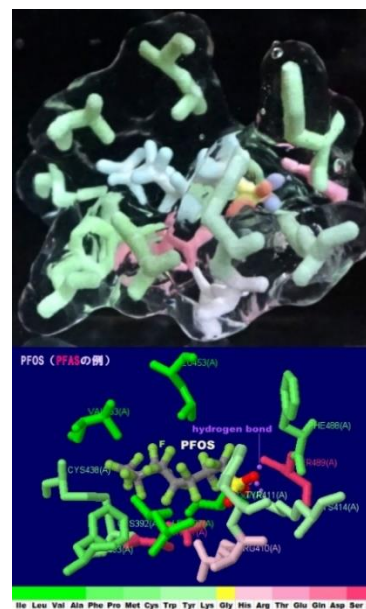
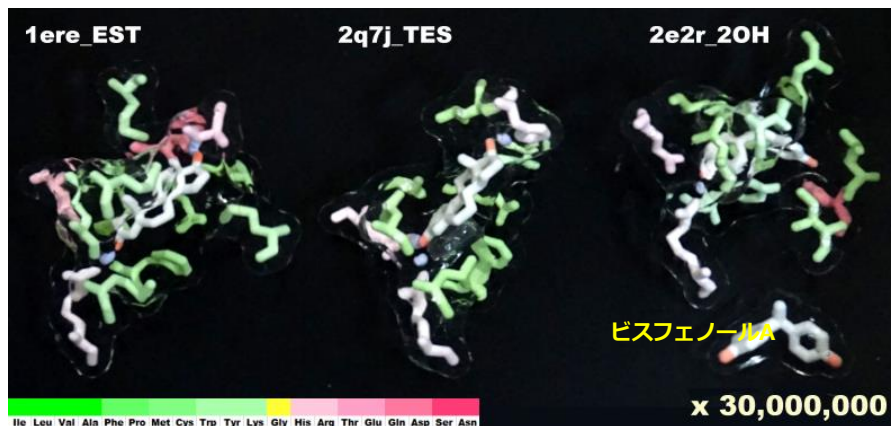
◎**Kawakami Model**(“鍵と鍵穴”模型も)ではタンパク質中のアミノ酸を有機概念図の無機性・有機性の比(特性基のI/○値)に基づいて着色しています。 <http://www.ecosci.jp/ocd/>

<http://www.ecosci.jp/ocd/>

Ile Leu Val Ala Phe Pro Met Cys Trp Tyr Lys Gly His Arg Thr Glu Gln Asp Ser Asn

◆川上モデル「鍵と鍵穴」模型

性ホルモンと環境ホルモン, **PFAS**



http://www.ecosci.jp/env/POPs_WWF_new20.html

<https://news.yahoo.co.jp/articles/5b2559de6dd753ba171397a7b6baa77a7f357ea7>

「猛毒の泡消火剤」PFASを浴びた「米軍基地で働く消防隊員たち」が怒りの告発！「なぜ日本人だけ検査を受けられないのか」《防衛省の態きの回答》

11/13(月) 7:03 配信 142

現代ビジネス

猛毒の泡で真っ白に

在日米軍は、PFASを含む泡消火剤について「16年以降、訓練では使用していない」とし、「23年6月までに、横田基地と嘉手納基地をのぞくすべての基地で交換を完了した」と発表している。泡消火剤による消火訓練が行われていたのは、青森・三沢、東京・横田、神奈川・厚木、山口・岩国、沖縄・嘉手納、普天間の各飛行場などだ。



“元素・分子が登場する本を読もう！”



PFAS汚染問題

<http://www.ecosci.jp/PFAS/>

JmolトピックNo.1091

<http://www.ecosci.jp/chem13/topics22e.html#01>

http://www.ecosci.jp/km/km_pdbsum.html

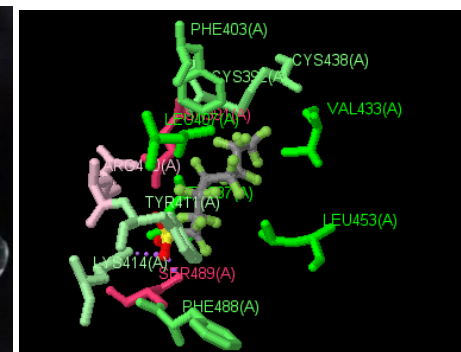
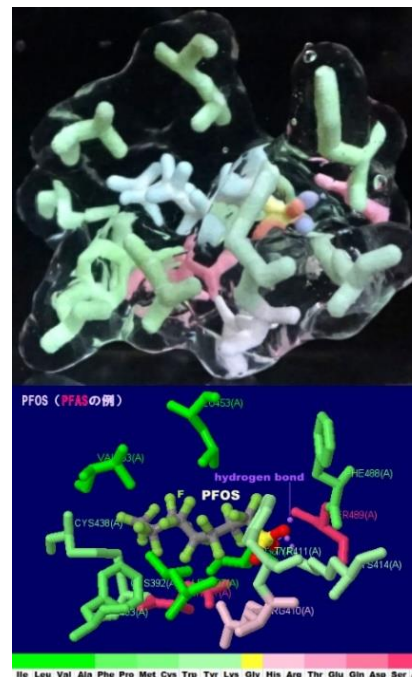
<http://www.ecosci.jp/PFAS/>

PFAS問題



<https://www3.nhk.or.jp/news/tokushu/20240612/pfasmap/>

<http://www.ecosci.jp/chem13/topics22e.html#01>



YAHOO! ニュース

[トップ](#)
[速報](#)
[ライブ](#)
[エキスパート](#)
[オリジナル](#)
[みんなの意見](#)
[ランキング](#)

主要 | 国内 | 国際 | 経済 | エンタメ | スポーツ | IT | 科学 | ライフ | 地域

分解されないから、永遠に残る化学物質「PFAS（ピーファス）」は、なにが怖い？

10/9(水) 8:30 配信  31    

行政が取り組むべきこととして声を上げることが重要

——PFAS問題を解決するため、一人一人ができることは
どんなことでしょうか。

原田：個人の生活を守るためにできることとしては、水道の汚染状況を知る、東京都などに設置されたPFAS汚染の相談窓口を利用する、浄水方法の改善を訴える、PFAS濃度が比較的高い地域では個人ごとに浄水器を設置するなど、の対策があります。

直接的な対策を個人で行うというのは難しいのですが、PFOS、PFOAについて行政や政治がしっかり取り組むべ

き課題だということを、国民として示す必要はあると思います。

Yahoo!ニュース, 2024/10/09

<https://news.yahoo.co.jp/articles/f20d395>

a397f1fcfd347a7d0c4588325a19f678f

http://www.ecosci.jp/km/km_pdbsum.html

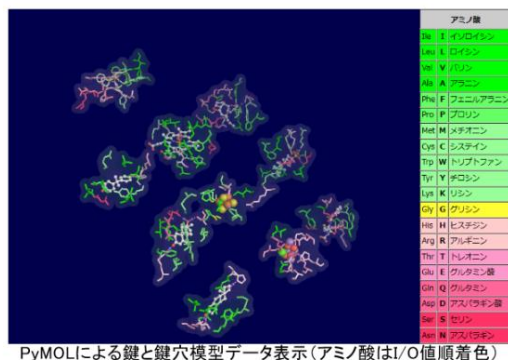
<http://www.ecosci.jp/PFAS/>

◆川上モデル「鍵と鍵穴」模型 画期的3Dプリンタ模型, 川上モデル

◆ 川上モデル | 鍵と鍵穴模型 ◆

→ 川上モデル(Kawakami Model)紹介 | 2014年は世界結晶年! | ecosci.jp 出前講座 // 3Dプリンタ参考情報 →

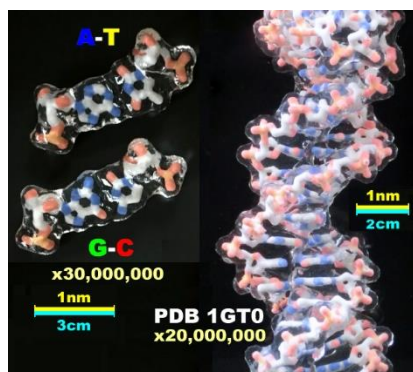
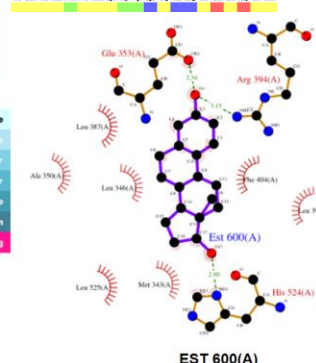
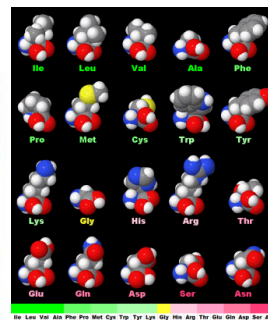
★模型製作は現在依頼中です。
※分子モデル表示はInternet Explorer!により可能です。



H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	L*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	A*	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
(L)	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
(A)	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Colors - Jmol

<http://www.ecosci.jp/ocd/>



「鍵と鍵穴」の構造情報を提供しているのが**PDBSum**サイト
<https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/cgi-bin/pdbsum/GetPage.pl?pdbcode=index.html>



生物の多彩な機能を担うタンパク質の設計図が**DNA**
<http://www.ecosci.jp/ocd/>

http://www.ecosci.jp/km/km_pdbsum.html

●川上勝, 生物物理 **55, 104-107 (2015)**
https://www.jstage.jst.go.jp/article/biophys/55/2/55_104/_pdf

生物物理 55 (2), 104-107 (2015)
DOI: 10.2142/biophys.55.104
発刊日: 2014 年 12 月 24 日

理論/実験 技術

3Dプリンターを用いたタンパク質分子模型の製作とその利用

川上 勝

山形大学工学部ライフ・3Dプリンティンクレーション創成センター

1. 再び注目された分子模型

分子模型は、手元で分子の構造を触りながらじっくりと、直観的に理解することができる優れたツールである。特に有機化学では経験的に模型が使われている。生物物理学/構造生物学の分野でも、Wilson と Cook が大きな DNA を自作して DNA の構造モデルに用いたり、Perutz と Kendrew はタンパク質の立体構造を決定作り、研究成果の発信に積極的に用いたりしていた。しかしほとんどの場合、分子数数千以上のタンパク質分子の模型を製作すると、部品を組み合わせるのに骨が折れるように、出来上がった巨大な模型を「手にして」認識することは、現実的ではなく、タンパク質の分子模型と言えば、大きなケース内に収められた展示物という認識であった。ところが、この状況が、3Dプリンターの出現によって、大きく変わろうとしている。3Dプリンターを用いれば、タンパク質の複雑な立体構造をいとも簡単に造形できる。実はかなり早前から3Dプリンターを用いた模型製作の提案がなされてきた。特に近年、フルカラー式3Dプリンターの普及が進み、世界中の研究施設において、3Dプリンターによるタンパク質やウイルス、微生物の模型製作が導入されるようになってきている。民間の模型製作サービスも登場し、タンパク質の分子模型は、徐々に研究や教育の現場に導入されつつある。

2. 透明で柔軟なタンパク質分子模型

ここで簡単に3Dプリンターの造形法について述べると、その代表的な手法として、光造形、粉末造形、選択的レーザー焼結、そして熱溶解模型(FDM)がある。どの手法も、作りたい物体の3Dデータから、Z軸に沿って1山の「断面図」データを用意し(CTやMRIの輪切り画像のようなものを想像して欲しい)、断面図データに従って、一枚一枚、平面状に「印刷」をし、これを積み重ねてゆく方式をとっている。3D

プリンターの最も特徴的な点は、印刷をずら積み上げてゆく手法であるため、「入れ子」構造であることが、細い可動部を持った機械部品であらうが、血管や神経のような生物が作り出す複雑な形状であらうが「一紙で」造形できる点にある(空中に浮いたような部分の印刷は、サポート構造と一緒に造形し、後から溶解や破壊除去する)。使用できる素材の種類も多彩なプラスチック、ゴム等の樹脂、金属、ガラス、紙など飛躍的に増えてきている。

しかし分子模型に関して言えば、現在の3Dプリンター技術を用いて作られた模型は、石膏や色のつかない樹脂製であるため、表現できる構造が制限され、また物性情報に乏しかった。とりわけ物理的に使いために、模型の最も有用な「自由に手に持って形を理解する」点で不十分であった。筆者は2008年に、これまでにない新しいタンパク質分子模型の概念を提案し、この開発を3D造形会社(スタジオミダス社:埼玉県上尾市)と共同で進めた。2009年には製造技術の特許¹を申請し、2012年には望みどおりの性能を持った模型製作技術が確立でき、この製法を論文²として発表し、製作の戦略を圖1に示す。まず、タンパク質分子構造ソフトを用いて、対象タンパク質分子の主鎖構造を任意のカラーリング、表示形式で描出する。必要であれば重要な側鎖も描出してよく、さらに、分子表面構造のデータも同時に描出し、これらをVRML(Virtual Reality Modeling Language)形式で出力する。この出力ファイルを、CAD(Computer Aided Design)編集

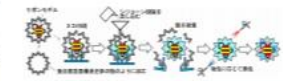
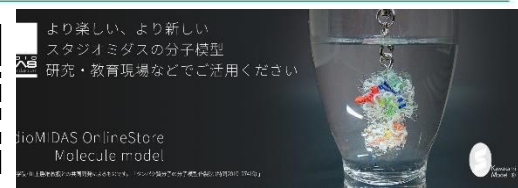


図1 新しいタンパク質分子模型(0.1mm未満)の製作過程の概観。(文庫3より改定、転載)

Protein Molecular Models by 3D Printing
Mitsuru KAWAKAMI
Life-3D Printing Innovation Center (L3PIC), Yamagata University



●川上モデル製作:スタジオミダス
<http://studio-midas.com/bunshi/>

Ile	Leu	Val	Ala	Phe	Pro	Met	Cys	Trp	Tyr	Lys	Gly	His	Arg	Thr	Glu	Gln	Asp	Ser	Asn

◆川上モデル「鍵と鍵穴」模型 画期的3Dプリンタ模型, 川上モデル

BasePairPuzzle

受賞者

上智大学 理工学部 物質生命理工学科 近藤次郎、株式会社StudioMIDAS 中村昇太

概要

分子が引きあう・離れる・反発する性質を表現したまったく新しいタイプの分子模型です。手のひらにちょうど収まる形状とサイズ、程よい磁力にデザインすることで、分子同士が相互作用する感触を心地よく体感できるようにしました。ポップな色調と上品な質感を持たせることで、いつでも触りたくなるような親しみやすい模型に仕上げました。

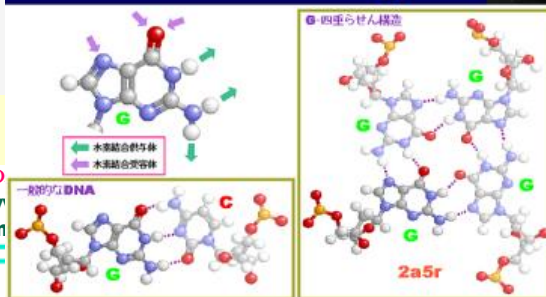
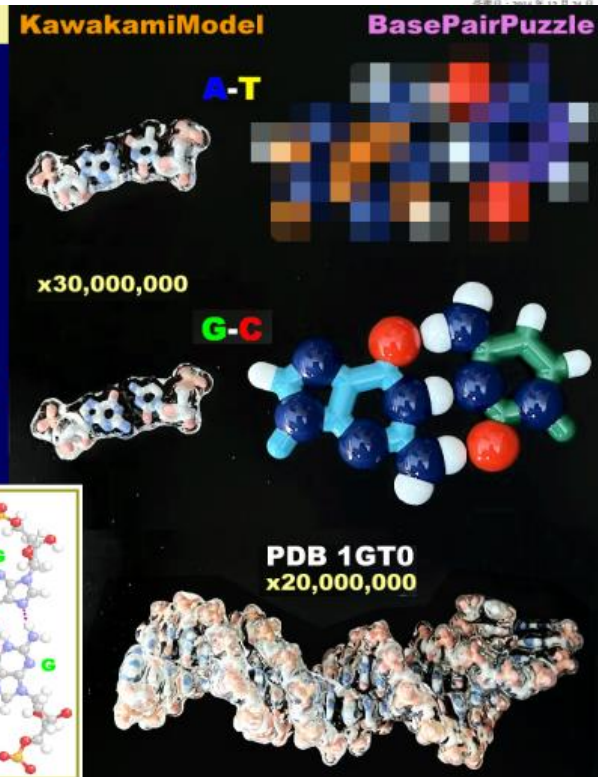
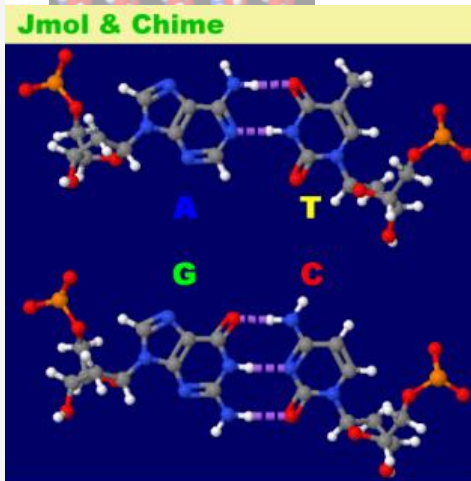
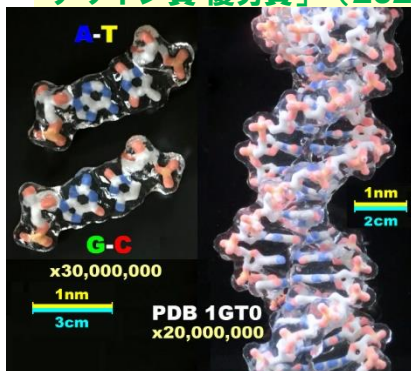
受賞理由

学習機材を親しみやすくポップに実現している。かわいくて思わず触りたくなる。



<https://jkondo.wixsite.com/basepairpuzzle>

BasePairPuzzleは「第11回かわいい感性デザイン賞 優秀賞」(2023年)を受賞



紹介展示: BasePairPuzzle模型 (A-T構造はモザイク処理; 3Dプリンタ模型は何れもスタジオミダス製)

生物の多彩な機能を担うタンパク質の設計図がDNA

<http://www.ecosci.jp/ocd/>

http://www.ecosci.jp/km/km_pdbsum.html

●川上モデル製作:スタジオミダス

<http://studio-midas.com/bunshi/>

◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFillの衝撃

“PDBsumサイトで入手したAlphaFold構造”

FASTA形式によるアミノ酸配列の表記例(P450 3A4)

PDB 2V0M_1|Chains A [23-507]

A screenshot of the PDBsum website. The header features the EMBL-EBI logo and the text "PDBsum Pictorial database of 3D structures in the Protein Data Bank". Below the header, there are navigation links: "Browse options:", "Database > Structure Database", and "Database > Sequence Database". The main content area displays a list of proteins with their names and accession numbers. The visible text includes: MAYGL, FKLLGIPGPTPLPFLGNILSYHKGFCMFDMECHKYKGVWGFYDGOQPVLAITDPDMIKTVLVKECY, VFTNRRPFPGVPVGMKSASIAEDEEW, KEMVPIIAQYGDVLRNLRLRAETGKPVTLKDVFVGAYSMDVITSTSGFVNIDSLNNPQ, DPFVENTKKLLRDFDLDPFFLSITVE, SVKRMKESRLDTQKHRVDLQLMIDSQNSKETESHKALSDLELVAQS I, IFIFAGYETTSSVLSFIMYELATHPD, YNETLRLFP IAMRLERVCKKDVEINGMFIPKGVVVMIPSYA, LHRDPKYWTEPEKFLPERFSKKNKD, CKETQIPLKLSLGGLLOPEKPVVLKVESRDGT, SGAHHHH.

UniProt accession P0

MALIPDLAMETWLLLVSLVLLY
VFTNRRPFGPVGFMKSAISIAED
DPFVENTKKLLRDFLDPPFLS
IFIFAGYETTSSVLSFIMYELA
LHRDPKYWTEPEKFLPERFSK

	2v0m (Chain A)					
--	----------------	--	--	--	--	--

<https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/cgi-bin/pdbsum/GetPage.pl?pdbcode=index.html>

アミノ酸		
Ile	I	イソロイシン
Leu	L	ロイシン
Val	V	バリン
Ala	A	アラニン
Phe	F	フェニルアラニン
Pro	P	プロリン
Met	M	メチオニン
Cys	C	システイン
Trip	W	トリプトファン
Tyr	Y	チロシン
Lys	K	リジン
Gly	G	グリシン
His	H	ヒスチジン
Arg	R	アルギニン
Thr	T	トレオニン
Glu	E	グルタミン酸
Gln	Q	グルタミン
Asp	D	アスパラギン酸
Ser	S	セリン
Asn	N	アスパラギン

Thr	Pro	Leu	Pro	Phe	Leu	Gly	Asn	Ile
Thr	Pro	Leu	Pro	Phe	Leu	Gly	Asn	Ile
Thr	Val	Leu	Val	Lys	Glu	Cys	Tyr	Ser
Thr	Val	Leu	Val	Lys	Glu	Cys	Tyr	
Leu	Leu	Glu	Met	Val	Pro	Ile	Ile	Ala
Leu	Leu	Glu	Met	Val	Pro	Ile	Ile	Ala
Asn	Ile	Asp	Ser	Leu	Asn	Asn	Pro	Gln
Asn	Ile	Asp	Ser	Leu	Asn	Asn	Pro	Gln
Pro	Arg	Glu	Val	Thr	Asn	Phe	Leu	Arg
Asp	Leu	Glu	Leu	Val	Ala	Gln	Ser	Ile
Asp	Leu	Glu	Leu	Val	Ala	Gln	Ser	Ile
Lys	Ala	Pro	Pro	Thr	Tyr	Asp	Thr	Val
Lys	Ala	Pro	Pro	Thr	Tyr	Asp	Thr	Val
Val	Val	Val	Met	Ile	Pro	Ser	Tyr	Ala
Val	Val	Val	Met	Ile	Pro	Ser	Tyr	Ala
Cys	Ile	Gly	Met	Arg	Phe	Ala	Leu	Met
Cys	Ile	Gly	Met	Arg	Phe	Ala	Leu	Met
Lys	Val	Glu	Ser	Asp	Gly	Thr	Val	
Lys	Val	Glu	Ser	Asp	Gly	Thr	Val	

◆AlphaFold/AlphaFold2 の衝撃

★2024年ノーベル化学賞受賞 #AI

The Nobel Prize in Chemistry 2024



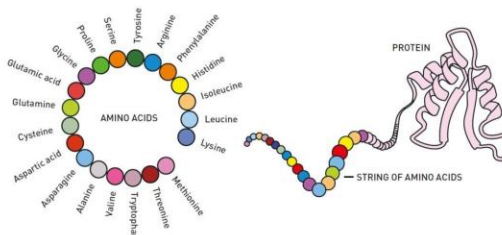
Dr. David Baker
Prize share: 1/2



Dr. Demis Hassabis
Prize share: 1/4

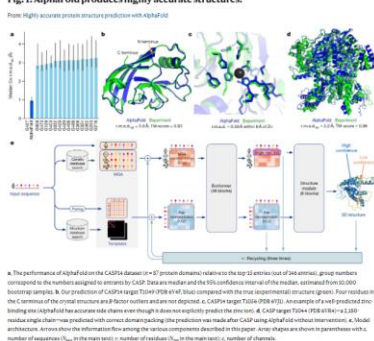


Dr. John M. Jumper
Prize share: 1/4



<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/summary/>

Fig. 1: AlphaFold produces highly accurate structures.



<https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>



<https://www.tkd-pbl.com/book/b10085696.html>



LASKER FOUNDATION

AlphaFold—for predicting protein structures

2023 Albert Lasker Basic Medical Research Award

Demis Hassabis
Google DeepMind

John Jumper
Google DeepMind

For the Invention of AlphaFold, a revolutionary technology for predicting the three-dimensional structure of proteins

The 2023 Albert Lasker Basic Medical Research Award honors two scientists for the invention of AlphaFold, the artificial intelligence (AI) system that solved the long-standing challenge of predicting the three-dimensional structure of proteins from the one-dimensional sequence of their amino acids. With brilliant ideas, intensive efforts, and supreme engineering, Demis Hassabis and John Jumper (both of Google DeepMind, London) led the AlphaFold team and propelled structure prediction to an unprecedented level of accuracy and speed. This transformational method is rapidly advancing our understanding of fundamental biological processes and facilitating drug design.

[Read More](#)

Lasker Foundation
<https://laskerfoundation.org/winners/alphafold-a-technology-for-predicting-protein-structures/>

実験医学 2023年10月号 Vol. 41 No. 16

AlphaFoldの可能性と挑戦

すぐ始められる構造・機能予測から、複合体予測やタンパク質デザインへの応用まで

高井健太郎／企画

2023年09月20日発行 B5判 129ページ 付録：WEB動画
ISBN 978-4-7581-2572-7

<https://www.yodosha.co.jp/yodobook/book/9784758125727/>

<http://www.ecosci.jp/AF/#nobel2024>

◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFillの衝撃

“PDBsumサイトで入手したAlphaFold構造”

◆ PDBsumサイトで入手したAlphaFold構造 ◆

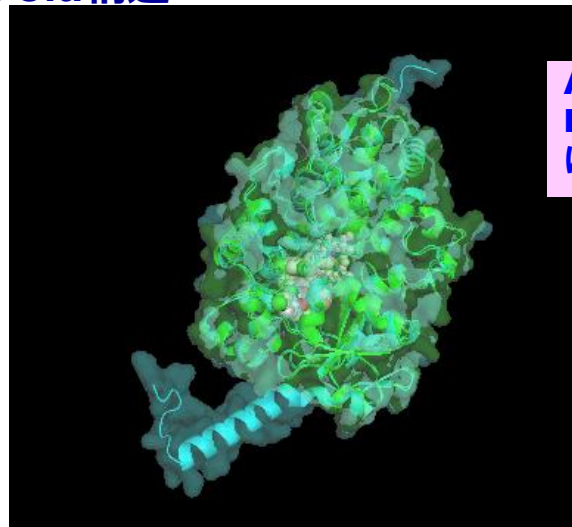
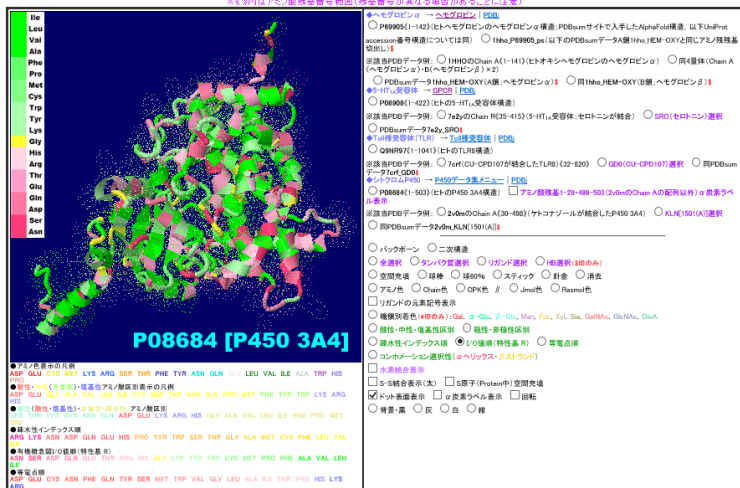
★PDBsumサイトでAlphaFold/AlphaFold2データを取得可能に(は自來データのみのみ)！
 ※PDBsumで入手可能なUniProt accession(またはUniProt id)入力により、



※本ページの分子モデルはWindows Internet ExplorerまたはMicrosoft Edge(Windows Explorerモード)で参照できます。
 ※本ページは、jsmol-バージョン10.0.75で構築されています。

PDBsumサイトで入手したAlphaFold構造例：初期表示はP06905(ヒトのヘモグロビンα)

※このリンクは、PDBsumサイトの「PDBsum」メニューからアクセスしてください。



AlphaFold 構造と
PDB 2V0MのPyMOL
による重ね合わせ

◆AlphaFold/AlphaFold2の衝撃
 “PDBsumサイトで入手したAlphaFold構造”

P450 3A4

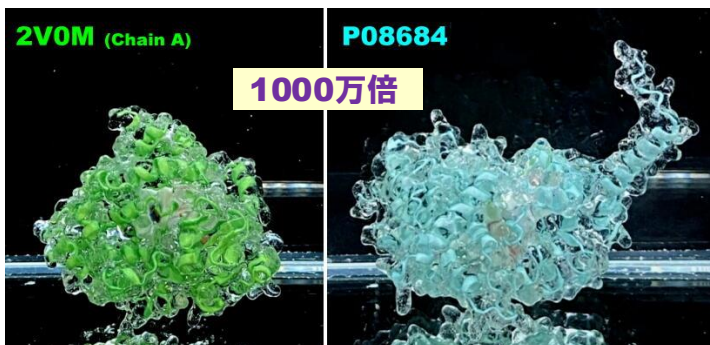
PDB 2V0M (Chain A) [30-400]
 P06905 [1-142]

http://www.ecosci.jp/AF/

http://www.ecosci.jp/p450/

“おにぎり”や“アリス”に例えられる

<http://www.ecosci.jp/AF/>



人工知能でタンパク質のカタチがわかったら？ (ロングバージョン)
 (© 東京大学)

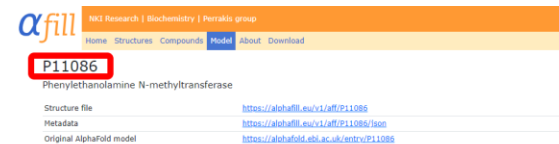
<https://www.youtube.com/watch?v=np7ZZ852ezQ>

...サイエンスアゴラ2021出展動画(ロング版)



◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFillの衝撃

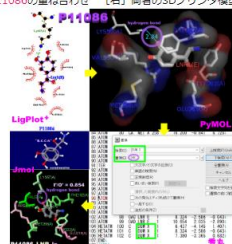
AlphaFill構造による3Dプリンタ模型



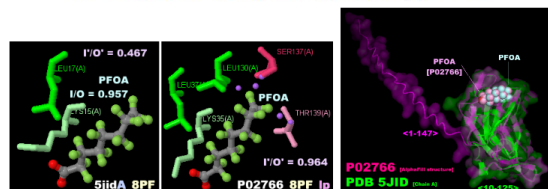
【左】ノルアドレナリン (noradrenaline, PDB 3HCD) による 【中】 両 (Jmol形式)
【右】 フェニルエタノールアミン-N-メチルトランスフェラーゼ 3hcd (Chain A) とAlphaFill構造 P11086のPDBsumデータ



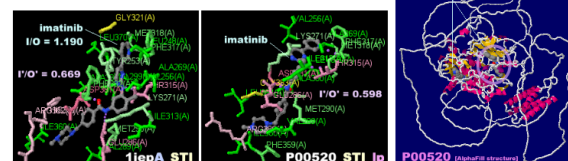
【左】 AlphaFill構造 P11086の空間表示 (空間充填表示が無秩序・非構造化領域)
【中】 PyMOLによる3hcdのChain AとAlphaFill構造 P11086の重ね合わせ (右) 両者の3Dプリンタ模型 (スタジオミクス製作; サイエンスアゴラ2023で表示)



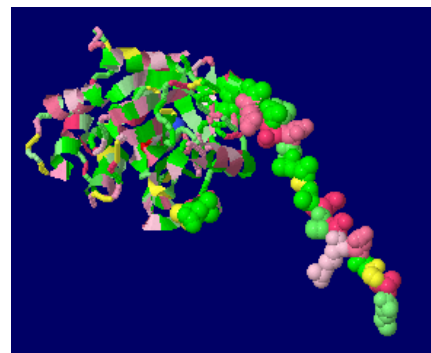
【参考】 AlphaFill構造からJmolの鍵と鍵穴データ作成の手順、LigPlot+で鍵と鍵穴データ作成→PyMOLでPDB形式データ取得→秀丸マクロと文字置換
("HB")にする→Jmolで水素結合認識) 処理→HTMLでJmol表示、他はcif→pdbデータ変換など。



PFOAが結合したヒト血清アルブミン5jiaAおよびAlphaFill構造 P02766のPDBsumデータ
→ PFAS汚染経路



イマチニブが結合したキリンレクターゼc-ABL 1iepAおよびAlphaFill構造 P00520のPDBsumデータと後者の全体構造
→ 抗がん剤開発と標的タンパク質 | PDBsumのLigand-SITE情報と有機性・無機性



nature methods

Explore content About the journal Publish with us

View all journals Search Log in

Sign up for alerts RSS feed

Articles > Open Access > Published 24 November 2022

AlphaFill: enriching AlphaFold models with ligands and cofactors

STANISLAV CHIRIBAN, GABRIELA DOLINS, DANIELA Z. GONCALVES & ANDREW DAVIES

Nature Methods 20, 205–212 (2023) | DOI: 10.1038/s41592-023-01458-1

44k Access | 59 Citations | 204 Altmetric | 385Citations

Abstract

Artificial intelligence based protein structure prediction approaches have had a transformative effect on biomolecular sciences. The predicted protein models in the AlphaFold protein structure database, however, lack coordinates for small molecules, essential for molecular structure or function: hemoglobin lacks bound heme; zinc finger motifs lack zinc ions essential for structural integrity and metalloproteases lack metal ions needed for catalysis. Ligands important for biological function are absent too: no ADP or ATP is bound to any of the ATPases or kinases. Here we present AlphaFill, an algorithm that uses sequence and structure similarity to transplant such missing small molecules and ions from experimentally determined structures to predicted protein models. The algorithm was successfully validated against experimental structures. A total of 12,029,789 transplants were performed on 995,411 AlphaFold models and are available together with associated validation metrics in the alphafill.us databank, a resource to help scientists make new hypotheses and design targeted experiments.

Main

Predicting the three-dimensional (3D) structure of a protein based on its amino acid sequence alone has been a major scientific challenge for decades. Recently, artificial intelligence approaches, as implemented in the AlphaFold and the RoseTTAFold methods, have made protein structure prediction unprecedentedly reliable. Both approaches predict domain structures with impressive accuracy, but flexible parts of the protein (such as loops or intrinsically disordered regions) are understandably predicted with lower accuracy and confidence. Predictions for the proteomes of 45 different organisms, as well as all SWISS-PROT entries, have been publicly available in the AlphaFold protein structure database¹—about a million predicted protein structures—at the time of this study, and more than 200 million followed in July 2022. These predicted models are already providing invaluable new biological insights regarding protein function.

The artificial intelligence prediction algorithms have not been trained to solve the protein folding problem from first principles. They have merely, yet impressively, learned the

Download PDF

Sections Figures References

Fig. 2: Screenshot of the AlphaFill entry page for cellular retinoic acid-binding protein 2 (AF-P29373).

View article Full size image

Fig. 3: Human myoglobin structures in AlphaFold and AlphaFill.

View article Full size image

Fig. 4: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 5: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 6: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 7: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 8: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 9: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 10: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 11: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 12: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 13: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

Fig. 14: Examples of transplanted zinc ions (green spheres).

View article Full size image

<https://www.nature.com/articles/s41592-022-01685-y>

<http://www.ecosci.jp/AF/>



Ile	Leu	Val	Ala	Phe	Pro	Met	Cys	Trp	Tyr	Lys	Gly	His	Arg	Thr	Glu	Gln	Asp	Ser	Asn

◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFillの衝撃

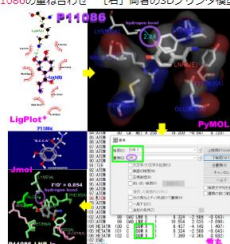
AlphaFill構造による3Dプリンタ模型



【左】ノルアドレナリン (noradrenaline, PuzMolによる) 【中】同 (Jmol形式)
【右】フェニルエタノールアミン-N-メチルトランスフェラーゼ 3hcd (Chain A) とAlphaFill構造 P11086のPDBsumデータ



【左】AlphaFill構造 P11086の回転画像 (空間充填表示が無秩序・非構造化領域)
【中】PyMOLによる3hcdのChain AとAlphaFill構造 P11086の重ね合わせ (右) 両者の3Dプリンタ模型 (スタジオミダス製作; サイエンスアゴラ2023で展示)



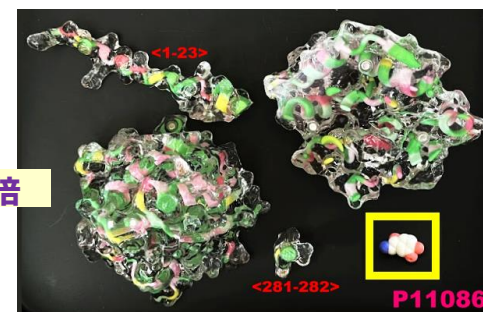
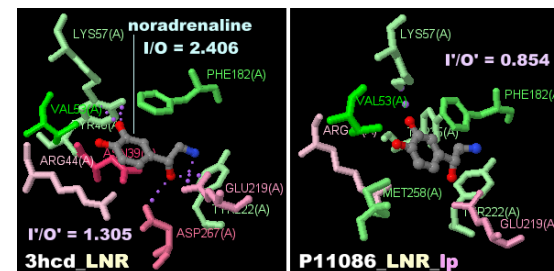
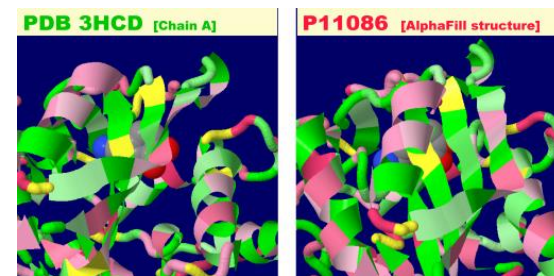
ノルアドレナリンが結合
したフェニルエタノール
アミン-N-メチルトラン
スフェラーゼ

【参考】AlphaFill構造からJmol"鍵と鍵穴"データ作成の手順: LigPlotで"鍵と鍵穴"データ作成→PyMOLでPDB形式データ取得→秀丸マクロで文字置換
("HB"にするとJmolで水素結合認識) 処理→HTMLでJmol表示. 他にCif→pdbデータ変換など.

アーゼ (-ase) は
酵素!!

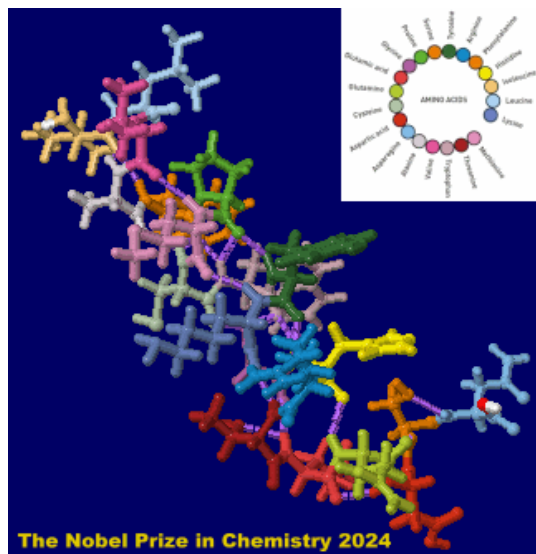
2000万倍

<http://www.ecosci.jp/AF/>

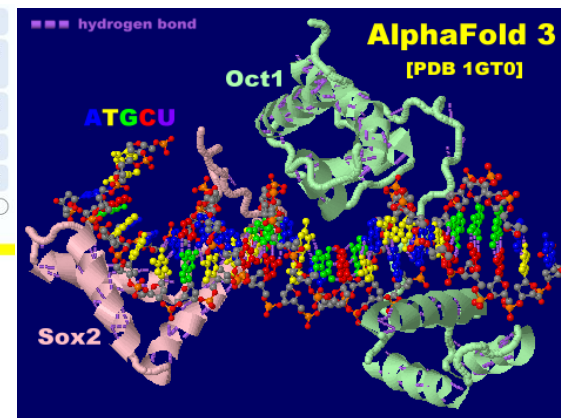
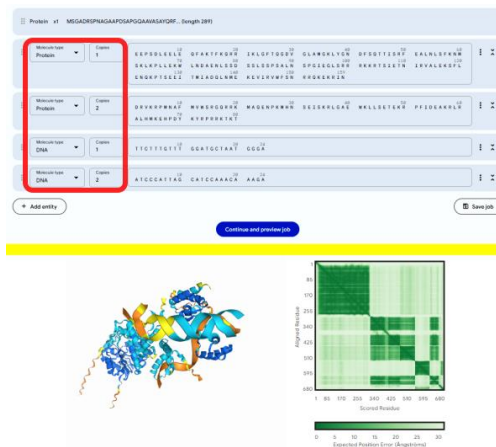


◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFold3の衝撃

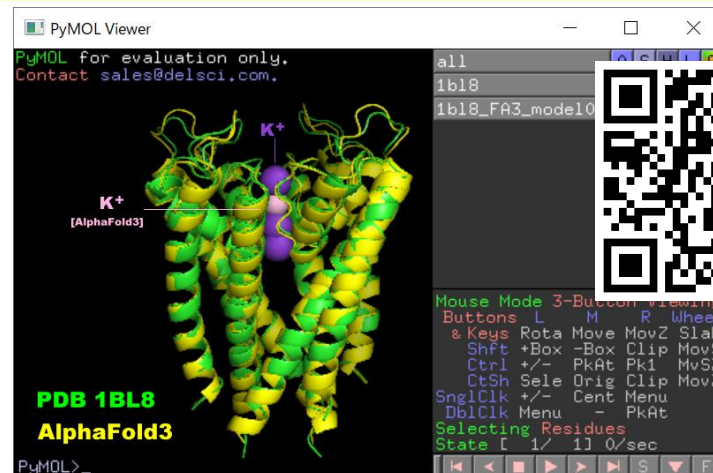
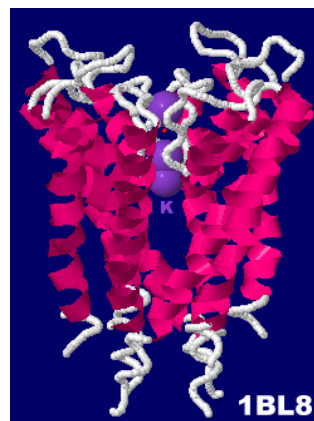
★2024年ノーベル化学賞受賞 #AI



- ★ノーベル化学賞2024受賞関連情報 ●一部は本ページ内記事の転載です
- The Nobel Prize in Chemistry 2024. [NobelPrize.org, 2024/10/09]_ [NEW] | Popular information
 - 2024年ノーベル化学賞：タンパク質の設計と構造予測に貢献した3氏に「自慢サイエンス」_ [2024/10/10]_ [NEW]
 - Chemistry Nobel goes to developers of AlphaFold AI that predicts protein structures. [Nature News, 2024/10/09]_ [NEW]
 - Protein designer and structure solvers win chemistry Nobel. [Science, 2024/10/09]_ [NEW]
 - Demis Hassabis & John Jumper awarded Nobel Prize in Chemistry. [Google DeepMind, 2024/10/09]_ [NEW]
 - 2024 Chemistry Nobel Awarded for Cracking the Secret Code of Proteins. [Scientific American, 2024/10/09]_ [NEW]
 - Explains Spacious Biology with CSM. [RCSB PDB, 2024/10/09]_ [NEW]
 - 2024年ノーベル化学賞は、「タンパク質の設計と構造予測」へ。[Chem-Station, 2024/10/09]_ [NEW]
 - 2024年ノーベル化学賞について分かりやすく解説！『計算によるタンパク質設計』と『タンパク質の構造予測』。[Lab BRAINS, 2024/10/10]_ [NEW]
 - ゲームオタクが変えた生命科学 福岡伸一氏「ノーベル賞はAI祭り」。(朝日, 2024/10/09) [NEW]
 - 森山由緒, 「総説 AlphaFold2までのタンパク質立体構造予測の動向とこれから」, JSB Bioinformatics Reviews, 2022年13巻2号 pp. 43-60
 - 富井健太郎編, 「AlphaFold時代の構造バイオインフォマティクス実践ガイド」, 実験医学別冊, 羊土社(2024) [NEW] (定価)
 - 富井健太郎企画, 「AlphaFoldの可能性と挑戦 すぐ始められる構造・機能予測から、複合体予測やタンパク質デザインへの応用まで」, 実験医学 2023年10月号, 羊土社(2023)
 - 雑誌特集「生命科学×AlphaFold」, その正体を探る」, 現代化学, 2024年7月号「東京化学同人」 [NEW]
 - ノーベル化学賞関連記事 無料公開！「東京化学同人」, 2024/10/09]_ [NEW]
 - 白木賢太郎, 「AlphaFold 革職科学に道出を始めた人工知能」, 現代化学 2021年10月号掲載
 - 森山由緒, 「【解説】世界最強のタンパク質構造予測ソフトウェアAlphaFold2 ―その登場が科学に与えたインパクトと原理・応用」, 化学 2022年2月号掲載



AlphaFold Serverでのタンパク質の amino 酸配列やDNAの塩基配列入力例と計算結果例, および得られたAlphaFold3構造例のJmolによる表示



カリウムチャネルPDB 1BL8と同データの amino 酸配列から得た AlphaFold3構造 (model 0) とのPyMOLによる重ね合わせ

<http://www.ecosci.jp/AF/#nobel2024>

◆AlphaFold/AlphaFold2 /AlphaFold3の衝撃

★2024年ノーベル化学賞受賞 #AI



★ノーベル化学賞2024受賞関連情報 ●一部は本ページ内記事の転載

- The Nobel Prize in Chemistry 2024. [NobelPrize.org, 2024/10/09]_ [N]
- 2024年ノーベル化学賞：タンパク質の設計と構造予測に貢献した者。 [2024/10/10]_ [NEWS]
- Chemistry Nobel goes to developers of AlphaFold AI that predicts protein. [2024/10/09]_ [NEWS]
- Protein designer and structure solvers win chemistry Nobel. [Science, 2024/10/09]_ [NEWS]
- Demis Hassabis & John Jumper awarded Nobel Prize in Chemistry. [Geosix.com, 2024/10/09]_ [NEWS]
- 2024 Chemistry Nobel Awarded for Cracking the Secret Code of Proteins. [Scientific American, 2024/10/09]_ [NEWS]
- Explains Space-based Biology with CSM. [RCSB PDB, 2024/10/09]_ [NEWS]
- 2024年ノーベル化学賞は、「タンパク質の計算による設計・構造予測」へ。[Chem-Station, 2024/10/09]_ [NEWS]
- 2024年ノーベル化学賞について分かりやすく解説！『計算によるタンパク質設計』と『タンパク質の構造予測』。[Lab BRAINS, 2024/10/10]_ [NEWS]
- タンパク質の設計と構造予測。[NHK, 2024/10/09]_ [NEWS]
- 森山由緒。『解説 AlphaFold2までのタンパク質立体構造予測の軌跡とこれから』。[JSB Bioinformatics Reviews, 2022年3巻2号 p. 43-60]
- 富井健太郎編。『AlphaFold時代の構造バイオインフォマティクス実践ガイド』。[実験医学別冊, 羊土社2024]_ [NEWS]_ [活用]
- 富井健太郎企画。『AlphaFoldの可能性と挑戦：すぐ始められる構造・機能予測から、複合体予測やタンパク質デザインへの応用まで』。[実験医学2023年10月号, 羊土社2023]
- 雑誌特集「発見特集」AlphaFold、その正体を探る。『現代化学, 2024年7月号] [東京化学同人]_ [NEWS]
- ノーベル化学賞関連記事 無料公開！『東京化学同人, 2024/10/09]_ [NEWS]
- 白木賢太郎。『AlphaFold 革職科学に道を開いた人工知能』。『現代化学2023年10月号収載』
- 森山由緒。『【解説】世界最強のタンパク質構造予測ソフトウェアAlphaFold2 ―その登場が科学に与えたインパクトと原理・応用』。『化学2023年2月号収載』



Lab BRAINS

2024年ノーベル化学賞について分かりやすく解説！『計算によるタンパク質設計』と『タンパク質の構造予測』

2024. 10. 10

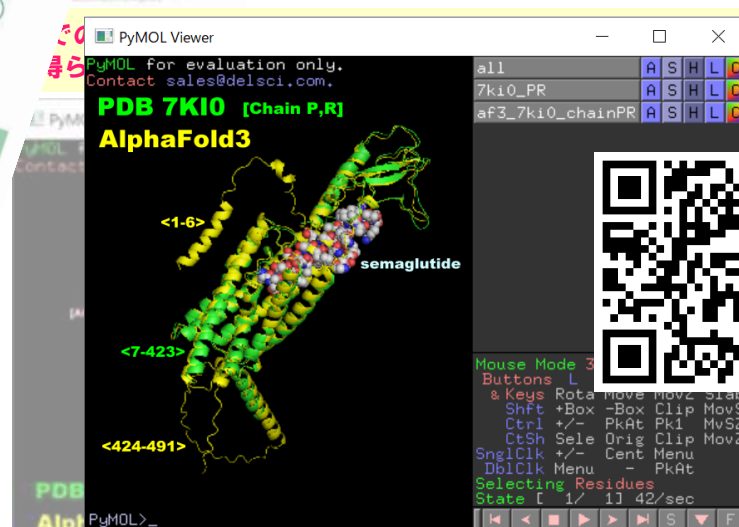
#化学 #数学・数理科学 #生化学 #ノーベル賞 #論文・論文解説

2024年ノーベル化学賞について分かりやすく解説！『計算によるタンパク質設計』と『タンパク質の構造予測』

(Credit: The Royal Swedish Academy of Sciences / Illustration: Johan Jarnestad / 画像引用元)



<https://lab-brains.as-1.co.jp/enjoy-learn/2024/10/70352/>



話題の「やせ薬」例のセマグルチド (semaglutide) PDB 7RBTのChain P・R (Chain P がセマグルチド) とそのAlphaFold3 (model 0) 構造とのPyMOLによる重ね合わせ

AlphaFold3構造 (model 0) とのPyMOLによる重ね合わせ

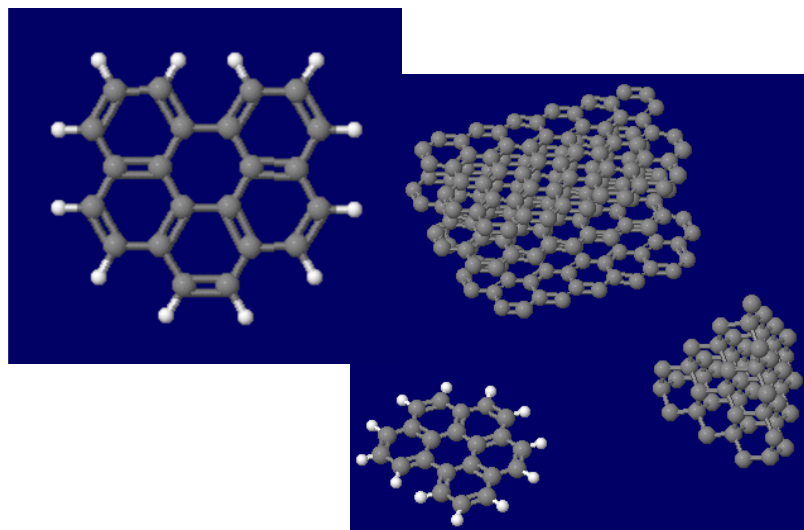
<http://www.ecosci.jp/AF/#nobel2024>

◆話題の「北海道石」も展示します!!

発見メンバーの田中陵二さんの協力を得て両イベントで展示します！



https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2023/20230614_1

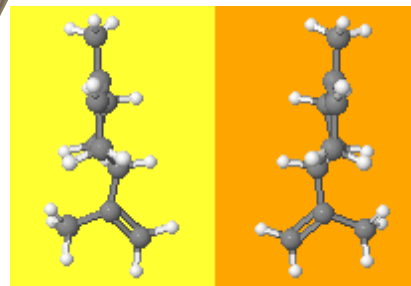
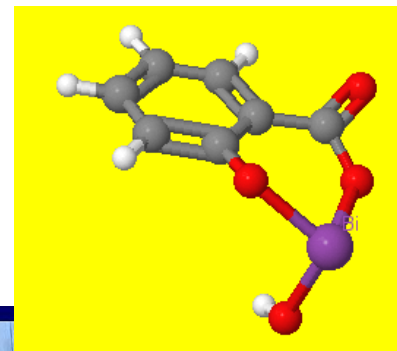


<http://www.ecosci.jp/chem13/topics23d.html#06>



http://www.ecosci.jp/sccj_sa2023/
<http://www.ecosci.jp/chem13/topics24d.html#04>

◆「元素楽章」で広がる元素の世界



<https://agedoridori.jimdofree.com/gensogakusho/>



揚げ鶏々のX (Twitter)

書籍特設サイト

SNS

元素楽章コンテンツ配達の拠点

ファン向け

PIXIV FANSOX

ゲーム

記念製作中!

X (Twitter) English

英語版元素楽章コンテンツの公式アカウント

BOOTH

元素楽章のグッズ販売

YouTube

英語版元素楽章コンテンツの公式チャンネル

LINEスタンプ

LINEで元素楽章のグッズを届ける

Instagram

英語版元素楽章コンテンツの公式アカウント

discordサーバー

英語版元素楽章コンテンツの公式サーバー

pixiv

英語版元素楽章コンテンツの公式アカウント

キャラクター

英語版元素楽章のキャラクター情報

ニコニコ動画

英語版元素楽章コンテンツの公式チャンネル

英語版元素楽章のグッズ販売

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b643655.html>

d-リモネン

No.0011

d-limonene

Structural formula

分子式 C₁₀H₁₆

分子量 136.2

沸点 -74 °C

融点 176 °C

状態

液体

無色透明

レモンの香り

classification

有機化合物

香料

レモンの香りの元となる化合物。2種類の立体異性体が存在し、天然に存在するのはd体のみ。そしてl体には全く香りが無い。

鏡の世界に映るレモンには香りが無いんだ。不思議だろ?

<https://x.com/GENSOGAKUSHO>

<http://www.ecosci.jp/gensogakusho/>