

AlphaFold時代の 構造バイオインフォマティクス

実践ガイド

今日からできる! 構造データの基本操作から
相互作用の推定、タンパク質デザインまで

contents

◆ 序	富井健太郎	3
-----	-------	---

第1章 概論と基礎知識

1	構造バイオインフォマティクスへの招待	富井健太郎	8
2	AlphaFold2の衝撃	大上雅史	15
3	AlphaFoldの予測構造を読み解くための基礎知識	西 羽美	27

第2章 立体構造データの入手と可視化・簡易計測

1	立体構造データの可視化と解析のためのツール	山守 優	36
2	各種立体構造データベースの種類と使い方	于 健, 栗栖源嗣	59
3	タンパク質の立体構造予測 ColabFoldとAlphaFold2	森脇由隆	80

第3章 立体構造によるタンパク質の機能推定

- 1 タンパク質-タンパク質の相互作用予測
AlphaFold-Multimer と AlphaFold3 森脇由隆 100
- 2 分子ドッキング法
タンパク質-化合物複合体の構造予測 石谷隆一郎, 力丸健太郎 108
- 3 MD シミュレーション
予測構造モデルの安定性や結合の強さを検証する 寺田 透 142
- 4 構造比較
立体構造を検索して比較する 木原大亮 168

第4章 応用・発展的研究

- 1 タンパク質の構造変化予測
AlphaFold と分子動力学の統合 岡崎圭一, 大貫 隼 184
 - 2 タンパク質デザイン AI の動向と利用のコツ 小林直也 191
 - 3 AlphaMissense による変異導入効果予測
タンパク質言語モデルと立体構造予測の融合 山口秀輝, 齋藤 裕 204
- ◆ 索引 211