

別冊

2024年11月発行予定

AlphaFold時代の構造インフォマティクス実践ガイド

AlphaFoldとその派生ツールを使いこなせ

(仮題)

編集／富井健太郎（産業技術総合研究所人工知能研究センター）

関連キーワード・技術

- ◆ タンパク質立体構造 ◆ AlphaFold3 ◆ ColabFold ◆ 可視化ソフト
- ◆ データベース ◆ PDB ◆ 相互作用予測 ◆ リガンド結合予測
- ◆ ドッキングシミュレーション ◆ MDシミュレーション ◆ 構造比較
- ◆ 近傍構造サンプリング ◆ タンパク質デザイン ◆ 言語モデル

AlphaFoldとそれによってさらに加速した構造インフォマティクスの可能性が、これまで構造生物学の視点を研究に取り入れていなかった分子生物学・細胞生物学・創薬研究者から大きな注目を集めています。一方、構造インフォマティクスは高度な構造生物学的な知識が求められ、また次々に新しいツールが開発されるため、自身の研究に取り入れるには敷居が高いと感じられているとの声を多数いただきました。そこで本書では、こういった構造インフォマティクスの初学者を対象とし「いま現在、何ができるのか」や「どんなツールを選択すべきか」といった点に焦点を当てた実践的な書籍を目指します。構造データの扱い方といった基本的な操作法から、多様な構造インフォマティクスの解析ツールの選び方、構造データを得て実際にどのような知見につなげていくのかなど、基本的な研究戦略とプロトコルを収載します。つきましては貴社の優秀な製品をPRする場としてご活用いただけますようお願い申し上げます。

本号へのご出稿のポイント

- 2024年5月に発表された最新のAlphaFold3の内容までカバー
- 生命科学・基礎医学・創薬分野の読者が広く見込まれます

広告料金表

ページ広告			
掲載面	刷色	スペース	掲載料金
表紙2	4色	1P	330,000
表紙3	4色	1P	275,000
中付 (記事中)	4色	1P	220,000
	1色	1P	165,000
後付	4色	1P	220,000
		ブリード版	242,000
	1色	1P	132,000
		1/2P	82,500
タイアップ広告 (記事広告)	4色	2P	掲載費 440,000
			編集費 88,000

※掲載頁をご指定の場合は10%増の費用を申し受けます
※中付(記事中)は1ヶ所につき1団体1頁のみ掲載可能です

発行概要

発行形態 B5版,フルカラー,オフセット印刷
発行予定日 2024年11月
広告申込締切 2024年10月21日(月)
広告原稿締切 2024年10月25日(金)
※日程は変更になる場合がございます

広告仕様 1頁 天地220mm×左右150mm
1頁ブリード版※ 天地257mm×左右182mm
1/2頁 天地105mm×左右150mm
※ブリード版は右記仕上がりサイズのほかに,広告4
辺に塗り足し+3mmをご用意ください

記事広告 ①貴社にて完成原稿をご用意いただく場合
広告上部(右上など)に『PR記事』の旨をご明記くださ
い。編集費は発生しません。
②弊社で製作する場合
貴社でご用意いただく原稿をもとに製作します(掲載
費+編集費を申し受けます)。詳細はお問い合わせく
ださい。

原稿製作に際して

- Adobe社の製作ソフト(Illustrator等,ver.2021まで対応可)にてご製
作のうえ,EPSもしくはPDFにてご納品ください。また,使用したOS・ソ
フトのバージョンをお知らせください
- テキストは完全アウトライン化し,カラー形式はCMYKにご設定くださ
い(モノクロの場合はK版のみで制作,もしくはグレースケール化)
- 写真や図版は元ファイル(リンクファイル)を同送もしくは埋込処理く
ださい
- ブリード版(裁ち落とし)は広告4辺に塗り足し+3mmをご用意くださ
い
- トンボ等を用いて仕上がりサイズをご指示ください
- “オーバープリント設定”にご注意ください(設定次第でテキストやオブ
ジェクトに意図せぬ色の変化や消失が起こる可能性があります)
- 原稿修正をご要望の際,費用が発生する場合がございます

【発行元】

株式会社 羊土社
〒101-0052
東京都千代田区
神田小川町2-5-1
TEL: 03-5282-1211
FAX: 03-5282-1212
URL: www.yodosha.co.jp/

【広告総代理店】

株式会社 エー・イー企画
〒532-0003
大阪市淀川区宮原2-14-14
新大阪グランドビル6F(大阪オ
フィス)
TEL: 06-6350-7162
FAX: 06-6350-7164
E-mail: adinfo@aeplan.co.jp

販売会社への情報共有について

貴社が広告掲載することおよびその広告内容を本書発行前に販売会社(理化学機器試薬等の商社や書店など)へ伝達する場合がございます。
これをご希望されない場合はお申込時にお知らせください(お知らせない場合は伝達させていただきます)。

広告掲載申込書

下記の通り, 広告掲載を申し込みいたします。

年 月 日

掲載雑誌・書籍名: 実験医学別冊「AlphaFold時代の構造インフォマティクス実践ガイド」

貴社名: _____ TEL: _____ FAX: _____

所在地: 〒 _____

担当者名: _____ 所属: _____ E-mail: _____

広告内容: 具体的にご記載ください
(ウェブサイトURLも可)

掲載場所: _____ 頁/枚 掲載料金: _____ 円

支払方法: _____ 支払日: _____

実験医学・羊土社書籍
へ初めて広告申込する
(もしくは過去に掲載
したか不明)場合はチ
ェック→



● 章 立 て

序文

富井健太郎 (産業技術総合研究所)

第 1 章 概論と基礎知識 [総説]

1. 構造インフォマティクス概論と本書の使い方

富井健太郎 (産業技術総合研究所)

現在および今後の立体構造データの状況 (豊饒さ), どのような立体構造データが存在するか, 立体構造データがもたらすものやそれらを使うと何ができる/わかるかを簡潔に紹介

2. AlphaFold の衝撃 (立体構造予測研究の歴史と AlphaFold のしくみ, 衝撃を与えた分野)

大上雅史 (東京工業大学)

データの蓄積や深層学習の発展によって AlphaFold がもたらされたことと, AlphaFold のしくみ (AlphaFold, AlphaFold2, AlphaFold3 の違いも), またどのような研究にデータが使われているのかいくつかの事例を紹介

3. タンパク質の立体構造を扱うのに必要な基礎知識

西 羽美 (東北大学)

予測された構造が正しそうかを「なんとなくでも」判断するために重要なタンパク質の基礎知識を紹介 (残基の疎水性・親水性, 二次構造, ドメイン, 天然変性領域やタンパク質の分類など)

第 2 章 立体構造データの入手と可視化・簡易計測 [総説+プロトコール]

1. 立体構造データの可視化 (分子描画) と簡易計測

山守 優 (産業技術総合研究所)

[総説] 代表的な可視化ソフト (UCSF Chimera, PyMOL, VMD など) のレビュー, データ形式について解説

[プロトコール] どれか1つのソフトについて, インストール, 対象選択, 着色描画, 二次構造計算, 原子間距離計算, 簡易な構造比較, 分子表面の計算, スクリプト利用法を解説

2. 立体構造データベース各種のレビューと, 検索・ダウンロード例

栗栖源嗣 (大阪大学)

[総説] PDB を中心に, AlphaFold DB やその他の NMR や CryoEM 関連 DB について紹介

[プロトコール] PDB での検索・ダウンロード手順を紹介

3. 立体構造予測 (ColabFold と AlphaFold2, AlphaFold Server)

森脇由隆 (東京大学)

[総説] ColabFold と AlphaFold2 の使い分け, それぞれの予測結果の見方などを解説

[プロトコール1] ColabFold の計算例 (手順) について解説

[プロトコール2] AlphaFold2 の計算例 (手順) について解説

[プロトコール3] AlphaFold Server の計算例 (手順) について解説

第3章 立体構造によるタンパク質の機能推定 [\[総説+プロトコール\]](#)

1. タンパク質-タンパク質相互作用予測 (AlphaFold-Multimer と AlphaFold Server)

森脇由隆 (東京大学)

[\[総説\]](#) AlphaFold-Multimer の概要, 注意点, 応用可能性などを解説

[\[プロトコール\]](#) Multimer の計算例 (手順) と AlphaFold Server での計算例について解説

2. リガンド結合予測 (ドッキングシミュレーション)

石谷隆一郎 (東京医科歯科大学)

[\[総説\]](#) 結合予測の概要, ツールのレビュー, DB (AlphaFill, ProBiS-Fold, (PoSSuM) など) の紹介

[\[プロトコール1\]](#) 古典的手法 (Glide あるいは AutoDock のどちらか) の解析手順・解析例・注意点などを解説

[\[プロトコール2\]](#) 深層学習モデルを利用した手法 (DiffDOCK など) の解析手順・解析例・注意点などを解説

[\[プロトコール3\]](#) AlphaFold Server の解析例を解説

3. MD シミュレーション

寺田 透 (東京大学)

[\[総説\]](#) MD シミュレーションの概要, ツールのレビュー, 最近の開発動向などを紹介

[\[プロトコール\]](#) GPL/LGPL の AmberTools と Gromacs の組み合わせの解析手順・解析例・注意点などを解説

4. 構造比較

木原大亮 (Purdue 大学)

[\[総説\]](#) 構造比較の概要から, ツール (Foldseek, 3D-SURFER, DALI など) のレビュー, 最近の開発動向など

[\[プロトコール\]](#) Foldseek, 3D-SURFER, DALI のいずれかの解析手順・解析例・注意点を解説

第4章 応用・発展的研究 [\[総説\]](#)

1. 近傍構造サンプリング

岡崎圭一 (分子科学研究所)

応用・発展的研究の方向性の一つとして, AlphaFold を利用した構造サンプリングに関する研究動向や成果など

2. タンパク質デザイン

小林直也 (奈良先端科学技術大学院大学)

応用・発展的研究の方向性の一つとして, タンパク質デザインに関する研究動向や成果などを紹介

3. 変異型タンパク質予測構造に基づく機能予測

齋藤 裕 (産業技術総合研究所)

応用・発展的研究の方向性の一つとして, 機能予測におけるタンパク質言語モデルの応用や AlphaMissense などについて紹介