

## 第 51 回熱測定ワークショップ開催報告

第 51 回熱測定ワークショップが、2014 年 6 月 28 日(土)に大阪大学医学工学研究科東京ブランチにおいて開催された。今回のワークショップは一昨年の 2012 年 9 月中旬に横浜にて開催された等温滴定熱量測定 (ITC) の解析に重点をおいた第 50 回熱測定ワークショップが非常に好評であったことに加えて、前企画幹事である大阪大学の内山 進先生が、ワークショップを本学会と共に主催する生体分子間相互作用解析フォーラム (BMIA forum) の世話人を務めていることから、内山先生にお世話していただく形で今年度も継続し、第 5 回 BMIA forum 研究会も兼ねて実施されたものである。大阪大学が東京に有するこの施設は JR 神田駅のすぐ近くに位置し、その立地条件のよさも相俟って、梅雨時期の小雨日の天候にも関わらず、大学および企業の方々 22 名に講師 2 名を加えて合計 24 名と、一昨年度の前回と同様に多くの参加者が集った。

ITC は分子と分子が結合する際の熱量変化を直接的に求める測定方法であり、結合熱はもとより、結合定数や結合数と言った分子間相互作用に関する熱力学諸量を決定することができる。近年、ITC 測定装置の高精度化と共に測定に必要な試料量の微量化が進み、タンパク質とリガンド間の相互作用解析に多用されている。特に医薬品デザイン分野においては、必要不可欠な標準的解析手法となりつつある。一方、ITC により得られたデータは装置付属のソフトウェアを用いて行われるが、正確なデータ解析や付随する誤差評価については、未開発の部分も多く、さらなる改良が求められている。このような背景のもと、今回のワークショップでは、ITC データ解析用プログラムの開発に携わっているテキサス大学の Chad Brautigam 博士と米国国立衛生研究所 (NIH) の Huaying Zhao 博士、2 名の研究者を講師に招き、ITC データの解析方法の講義と実習を行った。今回も前回と同様に、講義および実習を含めて進行は全て英語とし、また参加者全員がノート型パソコンを持参し、データ解析用プログラムを操作しつつ進められた。

ワークショップは午前 10 時から内山先生による開会の挨拶後、今回のワークショップ用に作成されたプログラムが配布され、参加者各人がそのプログラムをパソコンにイ

ンストールして開始された。まず、Brautigam 博士から ITC データ解析に利用できるプログラム (NITPIC (正確な ITC GUSSI (SEDPHAT データのグラフィック出力プログラム)) の概要とそれらの原理についての講義があった。引き続いて、Zhao 博士によるパソコン講習に移り、テスト用の ITC データを使用して、NITPIC でデータ処理後、SEDPHAT でデータ解析し、GUSSI で出力すると言う一連の ITC データ解析プログラムについて実習した。昼食後の午後 1 時過ぎからは、Zhao 博士によるパソコン講習を再開し、NITPIC、SEDPHAT および GUSSI に関するより高度な解析手法について実習した。その後、Zhao 博士による複数の実測した (ローカルな) ITC データを用いたグローバルな ITC データ解析の講義とこの解析と結びついた幾つかの結合モデルについての説明がなされた。15 分間の休憩を挟んで、午後 3 時過ぎから、Brautigam 博士による結果の最適化と統計的な誤差解析についての講義が行われ、続いて Zhao 博士による SEDPHAT を用いた ITC データ以外の複数データ (超遠心分析、動的光散乱、蛍光異方性、表面プラズモン共鳴等) を組み合わせたグローバルな多重方法解析 (GMMA) についての講義とそれに関連した実習を行った。両名の講師の熱心な講義と分かり易い実習のおかげで、ワークショップは活気のある雰囲気の中で絶えず進められ、予定終了時刻の午後 5 時を 40 分近くも超過する程に盛会であった。最後は BMIA forum 世話人である日本大学の有坂文雄先生による閉会の辞でワークショップは終了した。

今回のワークショップは全て英語で進められたため、特に実習におけるプログラム操作等に不安もあったが、Brautigam 博士らによる各人のパソコン操作への手助けのおかげもあり、特に問題無く終始スムーズに進行した。

最後に今回のワークショップにあたり、開催にご尽力いただきました内山先生並びに庶務幹事の京都府立大学 織田昌幸先生に御礼申し上げます。また、学会事務局、講師の先生方、ご支援を賜りました関連企業の方々および各地よりご参加いただいた受講者の皆様はこの場をお借りして謹んで御礼申し上げます。

(企画幹事 松木 均)



熱測定ワークショップの講義風景



熱測定ワークショップの実習風景