

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

計算生命科学のための 量子化学基礎

佐藤 文俊（東京大学生産技術研究所 教授）

「量子力学によって物理学や化学が取り扱う多くの分野で基礎となる法則が明らかになった」と言われている。しかし、法則が明らかになったことと、現実の研究の場にその法則を適用することとの間には多くの困難な問題が潜んでいる。本講義ではその困難を乗り越える前準備として、構造計算生命科学に必要な十分な範囲で、わかりやすく量子化学の基礎を紹介する。分子動力学法にのみ興味がある方も、導入として受講されると良いだろう。

- ＜今後の予定＞
- 2016/11/15 「フラグメント分子軌道法の基礎と応用」
北浦 和夫（京都大学福井謙一記念研究センター 研究員）
 - 2016/11/22 「QM/MM法を用いたタンパク質機能解析」
鷹野 優（広島市立大学大学院 情報学研究科医用情報科学専攻 教授）

開催日時：2016年11月8日（火） 17：00-18：30

【申し込み方法】

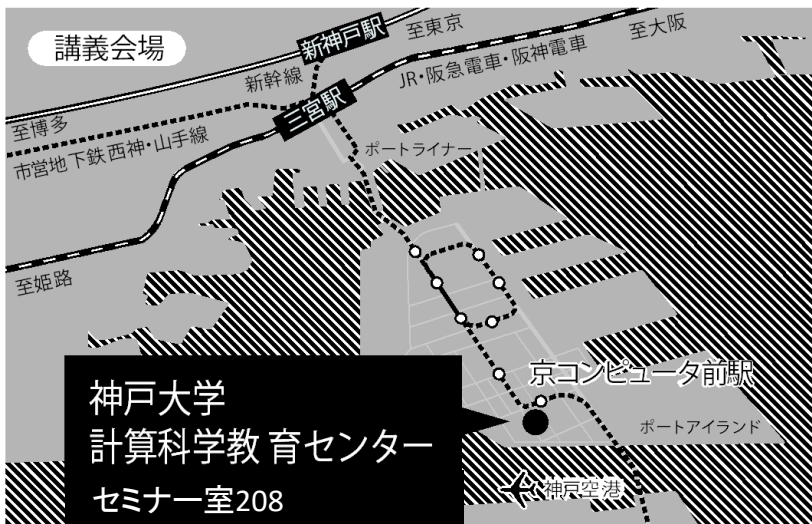
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

神戸大学計算科学教育センターのホームページから開催日前日までにお申し込みください。詳しくはホームページをご覧ください。

http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/distance_learning/life_science3/

★神戸大学会場受講の場合

申し込みなしでも当日参加可能です。直接会場にお越しください。会場では講師に直接質問が可能です。



〈講義スケジュール〉

はじめに	
2016/10/4	計算生命科学のための概要
第1編 バイオインフォマティクス	
2016/10/11	ゲノムに記された遺伝ビッグデータを読むーヒトゲノム計画から大規模個人ゲノム解読時代の到来までー
2016/10/18	ゲノム情報からの生命現象・病理現象の統計解析
2016/10/25	ゲノム・タンパク質のバイオインフォマティクス入門
2016/11/1	人工知能研究と生命科学ーディープラーニングのバイオテクノロジーへの応用可能性ー
第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション	
2016/11/8	計算生命科学のための量子化学基礎
2016/11/15	フラグメント分子軌道法の基礎と応用
2016/11/22	QM/MM法を用いたタンパク質機能解析
2016/11/29	分子シミュレーションを活用した創薬支援技術
2016/12/6	ドッキングソフトの原理と実際
第3編 計算生命科学の最前線	
2016/12/13	創薬における計算生命科学：インフォマティクスとシミュレーションを融合したインシリコスクリーニングと設計
2016/12/20	製薬企業におけるデータサイエンス
2017/1/10	計算生物学によるシステムの理解からの創薬への展開
2017/1/17	全脳アーキテクチャ・イニシアティブ：脳全体のアーキテクチャに学び人間のよような汎用人工知能の構築を目指す
2017/1/24	計算生命科学がもたらすものへの期待