

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

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）

タンパク質の丸ごと計算が可能なフラグメント分子軌道(FMO)法について、基礎と応用について講義する。FMO法は、分子を小さなフラグメントに分割して計算する方法であり、全系のプロパティに加えて、リガンドと各アミノ酸残基間の相互作用を解析できる。これから得られるリガンドの結合様式についての知見は、医薬品分子の設計に有用であると期待されている。本講義では、FMO法の基礎と医薬品分子設計への応用例を紹介する。

- <今後の予定> 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）
- 2016/11/29 「分子シミュレーションを活用した創薬支援技術」
広川 貴次（産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 研究チーム長、筑波大学 教授）

開催日時：2016年11月15日（火） 17:00-18:30

【申し込み方法】

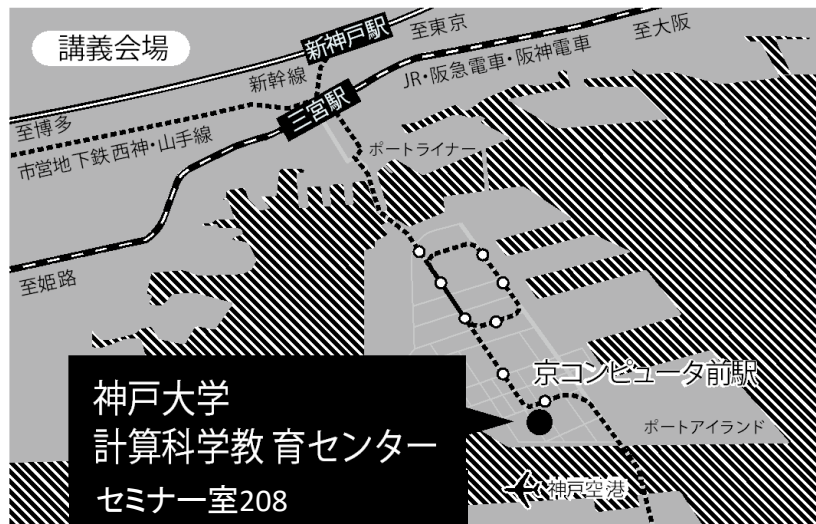
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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 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