

第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション

QM/MM法を用いた タンパク質の機能解析

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)

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮できるように、その「かたち」を変化させる。タンパク質機能の理解・予測に、機能発現に関わる局所部分（活性中心）には量子力学(QM)を、活性中心を取り囲むタンパク質の「かたち」の変化には古典力学(MM)を適用したQM/MM法は極めて有効である。本講義ではQM/MM法の理論背景からはじめ、タンパク質の機能解明への応用について紹介する。

- <今後の予定> 2017/11/29 「生命系の分子動力学シミュレーション」
池口 満徳 横浜市立大学大学院生命医科学研究科 教授
- 2017/12/6 「分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援」
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：2017年11月22日（水） 17：00-18：30

【申し込み方法】

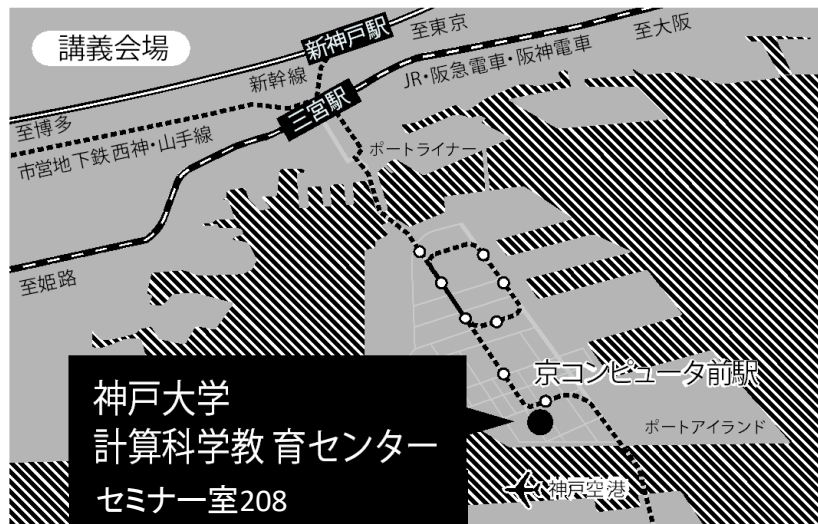
参加費は無料です。受講は、インターネット受講か神戸大学会場受講かを選択できます。参加する講義は1回からでも自由に選択可能です。

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_science4/

★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 | |
| 2017/10/4 | 計算生命科学の概要 |
| 第1編 ゲノムから構造までのインフォマティクスの基礎 | |
| 2017/10/11 | 遺伝統計学の基礎と応用 |
| 2017/10/18 | ゲノミクスからの構造インフォマティクス |
| 2017/10/25 | 電子顕微鏡解析 |
| 2017/11/1 | 機械学習・人工知能技術入門 |
| 第2編 構造生命科学のための分子シミュレーション | |
| 2017/11/8 | 計算生命科学のための量子化学基礎 |
| 2017/11/15 | フラグメント分子軌道法に基づく創薬分子設計の現状と課題 |
| 2017/11/22 | QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析 |
| 2017/11/29 | 生命系の分子動力学シミュレーション |
| 2017/12/6 | 分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援 |
| 第3編 計算生命科学の医療・創薬への応用 | |
| 2017/12/13 | 確率モデリング技術の基礎と応用～ビッグデータ活用のための人工知能技術～ |
| 2017/12/20 | ヒトを対象とした医学研究のデザインと解析手法 |
| 2018/1/10 | 計算システム生物学と創薬 |
| 2018/1/17 | 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最適化設計 |
| 2018/1/24 | Real World Data: 統計か疫学かコンピュータサイエンスか |