

第2編 タンパク質からみる生命科学

2.5

QM/MM シミュレーション
によるタンパク質機能解析

鷹野 優 (広島市立大学大学院 情報科学研究科 教授)

タンパク質は巨大かつヘテロな系であり、機能を有効に発揮するため、相互作用する対象や環境に対応して、その「かたち」を変化させる。このような複雑かつダイナミックなタンパク質が織りなす機能を理解・予測するために、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・ダイナミクスには古典力学(MM)を適用したQM/MMシミュレーションは極めて有効であり、特にタンパク質の理論的研究では常套手段となっている。本講義ではQM/MMシミュレーション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。

<次回の予定>

2015/12/16 3.1 製薬企業におけるデータ駆動型の研究開発
(都地昭夫、北西由武 塩野義製薬株式会社 解析センター)

開催日時：2015年12月9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/

お申込み先 http://www.eccse.kobe-u.ac.jp/entry/distance_learning/?id=674

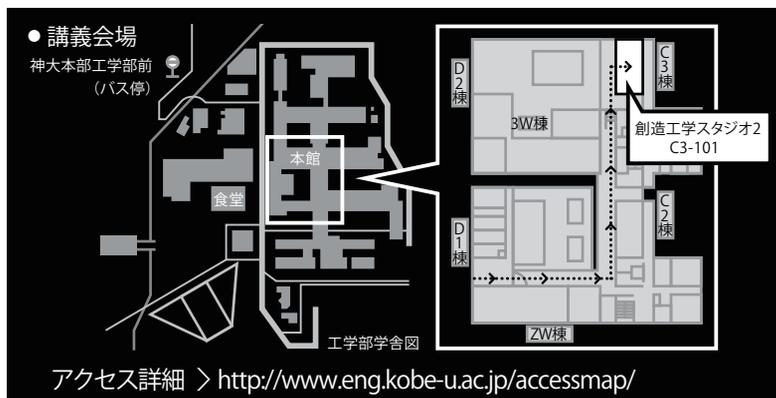
★神戸大学会場受講の場合

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。

【会場】

神戸大学工学部学舎1階 C3-101(創造工学スタジオ2)



<講義スケジュール>

第1編 ゲノムから見る生命科学

- 1.1 ヒトの病気はヒトの研究で～生命情報の統合によるヒト生物学と先制医療 (2015/10/14)
- 1.2 生物システムの設計：システム生物学から合成生物学へ (2015/10/21)
- 1.3 遺伝子ネットワーク解析：細胞の状態変化の過程を探る (2015/10/28)
- 1.4 到来する大規模生命情報の解析に備えて (2015/11/4)

第2編 タンパク質からみる生命科学

- 2.1 計算生命科学のための量子化学基礎 (2015/11/11)
- 2.2 タンパク質の量子化学計算 (2015/11/18)
- 2.3 分子動力学計算によるタンパク質の機能解析 (2015/11/25)
- 2.4 分子動力学計算を活用したインシリコ創薬 (2015/12/2)
- 2.5 QM/MMシミュレーションによるタンパク質機能解析 (2015/12/9)

第3編 医療・創薬における計算生命科学

- 3.1 製薬企業におけるデータ駆動型の研究開発 (2015/12/16)
- 3.2 フラグメント分子軌道法によるタンパク質-リガンド相互作用の高精度解析と創薬への応用 (2016/1/13)
- 3.3 創薬と医療のためのシミュレーション科学とビッグデータ科学 (2016/1/20)
- 3.4 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 (2016/1/27)
- 3.5 大規模計測と大規模計算の時代の脳科学 (2016/2/3)

詳しくはホームページでご確認ください。

主催：神戸大学計算科学教育センター

共催：神戸大学連携創造本部、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、産業技術総合研究所 HPCI 戦略プログラム分野1 人材養成プログラム、理化学研究所 計算科学研究機構

後援：兵庫県、神戸市、公益財団法人都市活力研究所、NPO 法人バイオグリッドセンター関西、公益財団法人計算科学振興財団