

公開講演会 最新化学談話シリーズ

平成 30 年度第 5 回談話会

分子動力学シミュレーションによる
タンパク質機能解析および創薬支援

山下雄史 特任准教授

(東京大学先端科学技術センター)

主催 九州大学理学部化学教室談話会

日時：平成 30 年 7 月 5 日 (木) 午後 4 時より

場所：九州大学理学部化学科 W1-B-315 講義室

(伊都キャンパス ウエスト 1 号館 3 階 315 号室)

内容：近年の計算機の発展により、分子動力学(MD)シミュレーションは適用範囲を広がっている。現在では、MD シミュレーションによりタンパク質のマイクロ秒オーダーの挙動を追うことができる。また、方法論やモデルも高精度化しており、定量的な解析が可能になっている。講演では、進化した MD シミュレーションをタンパク質機能の解析や医薬品開発の効率化に活用する事例を紹介しながら、分子運動の影響を考慮することの重要性を論じる。時間が許せば、機械学習的・計算幾何学的手法との融合による新しい解析法についても解説する。

(注)この講演は大学院集中講義の一部です。

連絡先：九州大学大学院理学研究院化学部門

(世話人) 吉田紀生：(092)802-4133

(事務局) 化学部門等事務室：TEL (092)802-4125