

健康“生き生き”羅針盤リサーチコンプレックス
2019人材育成プログラムシリーズ 情報計算科学セミナー 第11回(全11回)

創薬シミュレーション

● セミナー概要

創薬シミュレーションとは、コンピュータによる薬剤の探索手法で、標的タンパク質と薬剤候補のドッキング計算によるリガンドスクリーニングと、標的タンパク質と薬剤候補化合物複合体の分子動力学シミュレーションから成る。本セミナーでは癌関連タンパク質の薬剤スクリーニングや、薬剤親和性を高精度で評価可能なシミュレーション手法を紹介。また、癌やアルツハイマー病の治療薬として注目されている抗体薬についての計算手法を説明する。

● こんな方におすすめ

タンパク質のシミュレーションに関心のある方
薬剤が作用する機構を知りたい方
創薬に興味のある

<講師>

タンパク質の動力学に関する理論研究をしています。最近、巨大なモータータンパク質、ダイニンの分子動力学シミュレーション研究や、応用的な研究として創薬に必須なタンパク質と薬剤の結合構造や親和性を正確に求めるための方法論の開発をしています。



兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科
特任教授 **神谷 成敏**

2020.

参加無料

3/26 (木)
15:00-18:00

<メイン会場>

公益財団法人都市活力研究所

(大阪市北区大深町3番1号グランフロント大阪
ナレッジキャピタル タワーC7階)

会場は姫路・大阪・京都の3会場あります。
月ごとにメイン会場が変わり、他の2会場へは
TVシステムで中継します。
※会場詳細は裏面をご覧ください。

<申込み・問い合わせ>

氏名・ご所属・E-mail アドレス・開催日・参加会場
をご記入のうえ、メールにてお手続きください。

理化学研究所 リサーチコンプレックス戦略室
担当：神吉(かんき)

TEL: 078-569-8852

E-mail: kobe-rc-info@riken.jp

■ 姫路

兵庫県立大学先端医工学研究センター 姫路駅サテライトラボ

〒670-0913 姫路市西駅前町 73
 姫路ターミナルスクエア 4F
 TEL 079-287-6512
<http://amec-hyogo.org/access>



■ 大阪

公益財団法人都市活力研究所

〒530-0011 大阪市北区大深町 3 番 1 号
 グランフロント大阪
 ナレッジキャピタル タワー C 7 階
 TEL 06-6359-1322
<http://urban-ii.or.jp/about.php#ancer06>



■ 京都

京都大学 先端医療機器開発・臨床研究センター 502

〒606-8507 京都市左京区聖護院川原町 54
 京都大学医学部附属病院
 先端医療機器開発・臨床研究センター
<http://ccrmed.kuhp.kyoto-u.ac.jp/access.html>

<お知らせ>

2~3月開催は、神戸会場はありません。

