

第5回 神戸大学統合研究拠点サロン

構造ベース創薬の 現状と新しい 取り組み

SPring-8などの大型放射光施設を利用した分子構造解析を基に、計算科学を利用して薬を創る構造ベース創薬について、その現状と課題についてわかりやすくご紹介いたします。関連企業の方々に限らず、最近の創薬にご感心をお持ちの方々のご参加をお待ちしております。

2014年11月17日(月)

13:30 ~ 19:00 (受付:13:00 ~)

神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール

〒650-0047 神戸市中央区港島南町7-1-48

※ポートライナー「神戸空港行き」乗車
「京コンピュータ前駅」下車南へすぐ

主催 神戸大学統合研究拠点

共催 ひょうご神戸サイエンスクラスター
協議会

講演会
無料

交流会
2,000円

PROGRAM

- 13:30~13:35 開会挨拶
神戸大学統合研究拠点 拠点長 三宅 正史
- 13:35~14:25 基調講演
「タンパク質構造情報とリガンド情報を最大活用したインシリコスクリーニングを目指して」
理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター
制御分子設計研究チーム チームリーダー
本間 光貴 氏
- 14:25~14:55 講演1
「ポートアイランド地区における創薬イノベーションエコシステムの構築に向けて」
神戸大学連携創造本部 准教授 鶴田 宏樹
- 14:55~15:25 講演2
「構造ベース創薬における課題」
オープンアイ・ジャパン株式会社 佐藤 秀行 氏
- 15:25~15:40 休憩
- 15:40~16:10 講演3
「創薬におけるX線構造解析手法の課題と“超分解能解析”」
理化学研究所横山構造生物学研究室 研究員
仙石 徹 氏
- 16:10~16:40 講演4
「構造ベース創薬におけるFMO計算法の活用」
日本大学神戸歯学部化学教室 福澤 薫 氏
- 16:40~17:10 講演5
「みずほ情報総研におけるバイオ分子相互作用シミュレータの開発と民間への普及に対する取り組み」
みずほ情報総研株式会社サイエンスソリューション部
バイオエンジニアリングチーム
塚本 貴志 氏
- 17:30~19:00 交流会

理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター
制御分子設計研究チーム チームリーダー

本間 光貴 氏

新しい創薬では、病気に関わるタンパク質とそれに作用する化合物との結合性をコンピュータで解析(ドッキング)し、薬理効果を予測します。莫大な数の化合物を高速に、また正確にドッキングするには、多様な活性化合物を検出できるタンパク質構造を基にすることが必要です。このような目的に使用する、半自動高速最適化ソフトPALLASについてご紹介いたします。

神戸大学連携創造本部 准教授

鶴田 宏樹

神戸大学・応用構造科学産学連携推進センターと他大学・研究機関の連携による、SPring-8、京コンピュータ等の先進科学インフラ融合と、医療産業都市での活用を目指した「創薬イノベーションエコシステム」の構築についてご紹介いたします。

オープンアイ・ジャパン株式会社

佐藤 秀行 氏

タンパク質立体構造に基づく薬物設計(構造ベース創薬)は、創薬研究における重要な研究方法の一つですが、多くの研究事例が報告される中、その課題も見えてきました。講演では、これら課題とその解決策を取り上げます。

理化学研究所横山構造生物学研究室 研究員

仙石 徹 氏

X線結晶構造解析の精度は、回折データの分解能や精密化パラメータの精度に依存し、データベースに登録されたX線構造に誤りがあることもあります。X線構造の妥当性を評価し、より精密な構造決定に至る試みをご紹介します。

日本大学神戸歯学部化学教室 助教

福澤 薫 氏

フラグメント分子軌道(FMO)法は、高速、高精度に、化合物とタンパク質の結合ポケットに配置するアミノ酸残基との相互作用を、エネルギー指標によって評価します。このFMO法の概要と創薬への活用を中心に紹介します。

みずほ情報総研株式会社サイエンスソリューション部
バイオエンジニアリングチーム

塚本 貴志 氏

当社では、東大生産技術研究所を中心に開発されたバイオ分子相互作用シミュレータBioStationに独自機能とサポートを付けて、民間企業への普及に取り組んでいます。当社の活動と、シミュレータの概要についてご紹介いたします。

FAX 078-599-6711

必要事項をご記入の上、この用紙をファックスして下さい。

第5回 神戸大学統合研究拠点サロン 参加申込書

ひょうご神戸サイエンスクラスター協議会は、神戸ポートアイランド地区に集積が進む企業、大学、研究機関、研究支援機関等の有機的な連携と研究者のコミュニティを形成し、国際的な研究開発、産業化の拠点を形成することを目的として設置されました。協議会では、研究交流会を開催しており、計算科学をはじめとした分野で、学术界等からの最新の研究成果や情報を提供し、企業の技術者や学术界の研究者が相互に情報交換できる場づくりを目指しています。

① 御社名

② 部署名 / 役職名

※個人で申し込まれる場合は不要です

フリガナ

③ お名前

〒

④ ご住所

⑤ お電話番号

⑥ FAX 番号

⑦ E-mail

⑧ 交流会参加の有無

 有 無

※どちらかに必ず✓を入れてください。

お申し込み方法

2014年11月12日(水)までに、

FAXまたはE-mailにてお申込みください。

※E-mail の場合は、①～⑧の必要事項を記載してください

神戸大学統合研究拠点ホームページにも掲載しています。

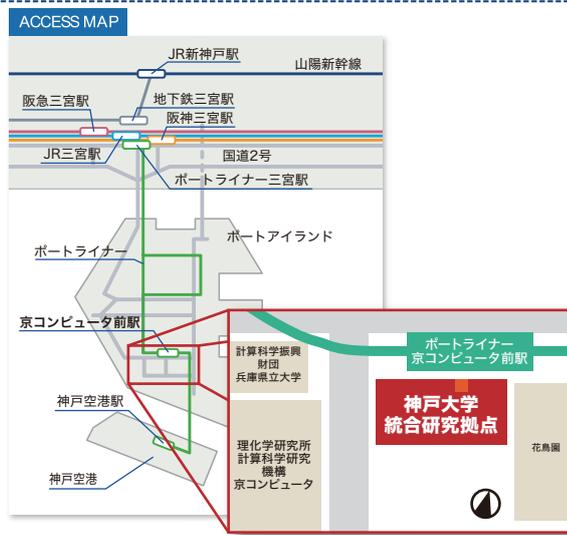
<http://www.kobe-u.ac.jp/kuirc/>

お申込み先

神戸大学統合研究拠点事務局

FAX : 078-599-6711 TEL : 078-599-6710

E-mail : ircpi-hall@office.kobe-u.ac.jp



① 個人情報の取扱について

本申込書にてご提供いただきました個人情報は、本サロンの受付・運営に関する業務のほか、神戸大学、ひょうご神戸サイエンスクラスター協議会が実施する各種事業に関する情報提供に利用させていただきます。

なお、ご本人様の同意がある場合、または、法令に基づく正当な理由がある場合を除き、上記目的以外での利用及び第三者への開示・提示はいたしません。