



公立大学法人 兵庫県立大学
先端医工学研究センター

第11回 医工連携セミナー

The 11th AMEC Medical Engineering Seminar

日時 : 2018年7月18日(水) 17:00~18:00

場所 : 姫路ターミナルスクエア 2階会議室

姫路市西駅前町7-3

・JR 姫路駅より徒歩1分(歩行者デッキ直結)

・山陽電鉄姫路駅より徒歩1分

講師

福澤 薫 (ふくざわ かおり) 先生

星薬科大学 薬学部 准教授



「フラグメント分子軌道法に基づく創薬プラットフォームの構築」

近年の計算技術やAIの発展に伴って、新薬の開発プロセスにおいても計算科学(in silico)による効率化が期待されています。医薬品候補化合物の探索では、標的タンパク質に対する化合物の親和性を予測する必要がありますが、従来法では精密さの点で十分とは言えませんでした。フラグメント分子軌道(FMO)法は、核酸やタンパク質などの生体高分子の全電子計算を高速かつ高精度に実行することができる量子化学計算手法です。X線結晶構造の理論的な解釈やそれに基づいた高精度な構造ベース創薬に活用できるため、新規化合物の精密な設計や合理的なリード化合物の最適化、インシリコスクリーニング、さらにはビッグデータに基づく創薬へと繋がるのが期待されています。私たちは、産学官連携のFMO創薬コンソーシアム(FMODD)とスーパーコンピュータ「京」を活用し、これまでにない高精度な構造ベース創薬を実現するための創薬基盤を構築しています。本セミナーではFMO創薬の取り組みや、FMO法を活用した、ドラッグ・デリバリーシステム(DDS)製剤への応用についてもご紹介します。

主催 : 公立大学法人兵庫県立大学 先端医工学研究センター

Language(言語) : Japanese(日本語)

問合せ・参加申込先(先着順) : 兵庫県立大学先端医工学研究センター

TEL : 079-287-6512 FAX : 079-287-6513

e-mail : info@amec-hyogo.org

※参加申込は、ご所属・お名前・セミナー終了後交流会(会費:4,000円)への参加の有無を記載し
7月10日(火)までにお願ひします。



AMEC

Advanced Medical Engineering Center