



NPO 法人

mRNA ターゲット

創薬研究機構

## 平成 30 年度第 2 回講演会 「計算科学を用いた核酸と低分子の 相互作用解析と創薬技術の創出にむけて」

演者 川上功太郎

三菱ガス化学株式会社 事業戦略室

計算科学は、理論・実験と並ぶ科学技術の第 3 の手法として、現象の解明や理解、反応予測を行う研究手法として欠くことのできないものとなっている。近年、コンピュータの計算能力の飛躍的な向上と革新的な計算理論・計算手法の開発、普及により、計算科学が適用できる領域が広がっている。有機化合物などの低分子だけでなく、タンパク質や核酸などの生体高分子といった大きな系でさえ、計算化学シミュレーションが現実のものとなってきている。そのため例えば量子化学計算を用いて、核酸-低分子の相互作用解析を行うことで、相互作用における分子の役割がわかり、また核酸-低分子の結合経路を量子化学計算で予測できれば、反応機構解析や精密な分子設計ができるだろう。本講演では、まず量子化学計算とはどういうものかを計算の専門家でない方にもわかっていただくよう簡単に説明する。次に量子化学計算を用いた核酸における研究例を紹介し、核酸の分野でどのように量子化学計算が使用されているかの一部を説明する。最後に核酸—低分子の結合経路の解析に関する著者の研究の一部を紹介する。本講演を通じて、創薬に向けた分子設計のアイデアに繋がれば幸いである。

日時：平成30年10月9日（火） 14:00～16:00

場所：ペリエホール Room C（JR千葉駅直結）

参加資格： 正会員、学生会員、賛助会員 ※賛助会員(団体) 1口5名まで

参加登録： 必要、参加費：無料（事前に年会費をお支払いください）

入会および参加登録の情報はホームページで <http://www.mrna-target.org/>

問合せ先：お問い合わせ [npo\\_support@mrna-target.org](mailto:npo_support@mrna-target.org)