

# 「情報生命特別講義第三」



テーマ：“創薬インフォマティクス”

講師：広川 貴次氏

(産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 分子シミュレーションチーム長)  
(筑波大学 教授、北海道大学大学院 客員教授、東京大学大学院 客員准教授 等併任 )

教室：大岡山 西8号館E棟10階 W8E-1003L(遠隔コラボルーム)

前学期集中 1単位  
担当教員：秋山 泰



- 第一日 平成28年5月18日(水) 5-10限 13:20～18:20
  - 分子表記および構築：化合物データの取り扱い、表現方法
  - 化合物記述子：簡易な記述子から、トポロジー情報、物理化学的情報に基づく記述子まで
  - データ解析：化合物記述子に基づく構造活性相関に必要なデータ解析手法
  - 化合物類似検索：様々な手法を用いた類似性検索手法
- 第二日 平成28年5月25日(水) 5-10限 13:20～18:20
  - タンパク質モデリング：ホモロジーモデリング法
  - 標的タンパク質同定：配列、立体構造情報に基づくタンパク質機能推定法と創薬標的への応用
  - リガンドドッキング：ドッキング法のアルゴリズム、応用手法
  - バーチャルスクリーニング：タンパク質立体構造に基づくバーチャルスクリーニング法

※生命理工学研究科開講科目です。未申告の方は、教務Webシステムから「追加申告」してください。  
問合せ先：情報生命博士教育院 大岡山事務室(内線3755)