



# 「創薬研究における計算化学の役割」

## 吉留 大輔 先生

シュレーディンガー株式会社 シニアサイエンティストII

日時：2019年6月5日(水) 16:00 - 17:30

会場：創薬科学研究所 2階 講義室

計算化学に関する学術的理論の進歩とコンピュータハードウェアの発展を受け、ドッキングシミュレーションや量子化学計算、分子動力学シミュレーション、ケムインフォマティクス解析等、創薬における計算化学がこれまで以上に重要な役割を果たすようになった。

大学での研究においても、多様な専門分野の研究者が計算化学の力を借りる場面も増えている一方、理論的背景を抑えておかなければならないという不安は初めて取り掛かる際の障壁ともなり得る。

このセミナーではそのような抵抗感を少しでも取り払うべく、基礎的な概念の解説や適用例の紹介を始めとして、実際に学術研究に適用する上での要所を、自社のソフトウェアを通じて数多くの研究者を支援して来た立場からのメッセージとしてお伝えしたい。

【計算化学に馴染みの薄い学生を主な対象としますが、計算化学に馴染みのある研究者にも有益な場とできるよう、最新の技術動向やその成果も組み込んでいただける予定です。】