

日時: 2014 年 10 月 30 日 13:30-15:00

場所: 研修室

フォーカストセッション

計算化学とデータベースの融合

Collaboration between computational chemistry and database

開催趣旨:

近年、生命科学に関連する多様なデータベースが作成・公開され、それらを利用することが重要な研究手段の一つとなっている。本セッションでは、既存データベースを利用した応用研究および計算化学に関連したデータベースの作成を行っている 4 名の先生方にご講演いただく。

モデレーター: 石川 岳志 Takeshi Ishikawa
長崎大学 Nagasaki University

量子化学計算による相互作用エネルギーの空間分布と PDB 中リガンド原子の空間分布の解析

渡邊 博文 Hirohumi Watanabe
理化学研究所 RIKEN

従来ドッキングに用いられてきた古典力場に基づくスコア関数は、分極や電荷移動の効果が取り込まれておらず、その精度に問題があった。本研究では、高精度の量子化学計算を用いてプローブ分子とアミノ酸との相互作用エネルギーの空間分布を計算し、古典力場、および PDB 中のアミノ酸残基の周辺のリガンド原子の実際の分布と比較した。

量子化学文献データベース QCLDB II: その学術的意義と今後に向けて

森 寛敏 Hirotoshi Mori
お茶の水女子大学 Ochanomizu University

量子化学文献データベース(QCLDB)は、1975 年より現在まで、国内の量子化学研究会のメンバーが構築してきた量子化学の文献データベースである。情報計算生物化学分野・創薬の分野で、量子化学の手法は研究開発を後方支援する手法として重用される。本講演では QCLDB の特徴と、今後の発展に向けた課題について紹介・議論したい。

電子状態計算を基盤とする分子探索システムの開発

杉本 学 Manabu Sugimoto
熊本大学 Kumamoto University

分子の電子状態はその反応性と物性を決定する重要因子である。本講演では、電子状態計算の結果を集積したデータベースを作成するとともに、電子状態的特徴に基づく分子探索手法を開発し、薬理活性解析に用いた結果を紹介する。

理論化学計算による第一原理からの小分子データベースの構築

中田真秀 Maho Nakata
理化学研究所 RIKEN

第一原理計算を使った小分子のデータベースを作成している(<http://pubchemqc.riken.jp/>)。PubChem から分子の情報を取得し、構造最適化計算および励起状態計算を行ったものを現在 15 万分子程度公開している。