

第10回 FMO 研究会「異分野に広がる FMO 法の活用」 Applications of FMO method to multidiscipline research field

開催趣旨:

日本発の理論手法であるフラグメント分子軌道(FMO)法の普及に伴って、FMO法が生命科学の幅広いタンパク質の理論的な解析に有効であることが判ってきている。第10回となる今回のFMO研究会では、実験的手法やインフォマティクス手法との融合によって開ける、FMO法の新たな研究領域への展開について議論したい。

本セッションでは、3名の先生方にご登壇いただき、それぞれのご専門分野におけるFMO法の有効活用について、実例や今後の展望を交えながらご紹介いただく。多くの皆様のご参加と活発な議論をお待ちします。

モデレーター: 福澤 薫 Kaori Fukuzawa

日本大学松戸歯学部 School of Dentistry at Matsudo, Nihon University

古明地 勇人 Yuto Komeiji

産業技術総合研究所

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

1. GPCR 構造解析と創薬における FMO 活用の提案

鶴田 宏樹 Hiroki Tsuruta

神戸大学連携創造本部

Center for Collaborative Research and Technology Development (CREATE), Kobe University

抗GPCR抗体を用いたGPCR構造解析とFMO計算法などを組み合わせた構造ベース創薬の実効性や課題、産学官連携でのソリューション創出についての議論を展開したい。

2. 電子状態インフォマティクスによる生体分子機能解析

杉本 学 Manabu Sugimoto

熊本大学大学院自然科学研究 Kumamoto University

電子状態計算で得られる数値データから様々な情報を獲得するための手法を紹介し、実際の応用を通じてその有用性と問題点、将来展望について議論したい。

3. 耐熱性 β -フルクトフラノシダーゼの開発

嶋根 康弘 Noriaki Hashimoto

国立研究開発法人海洋研究開発機構 Japan Agency for Marine-earth Science and Technology

機能性オリゴ糖の一種、ラクトスクロースの合成を触媒する β -フルクトフラノシダーゼの耐熱化を目的として、ランダム変異法等による機能改変とFMO法による安定性の評価を試みた。