

TS02

日時： 2025年10月27日 13:00-17:00

場所： 4F 401

FMOデータベース実践チュートリアル
-生体高分子の量子化学的分子間相互作用データの活用-

Practical Tutorial on the FMO Database: Utilizing Quantum Chemical
Intermolecular Interaction Data of Biomacromolecules

フラグメント分子軌道（FMO）計算結果を収載したFMOデータベース（FMO DB; <https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>）は、2019年2月の一般公開以来データ数を増やし、2024年7月29日時点で37,426個のFMO計算データ(ユニークなPDB ID: 7,782)を公開している。最近では、富岳等のスーパーコンピュータを用いた大規模な解析、SCOP2のタンパク質基本フォールド代表構造の網羅計算、FMOデータからの相互作用エネルギーの特徴量抽出やAI予測等の取り組みも進んでいる。本セッションでは、初学者向けのFMO DBの概要の紹介から、実際に登録されているデータを用いた創薬研究のための解析方法や最新の研究事例を紹介する。当日は、実際のFMO計算の解析をチュートリアル形式で実施する。FMO DBの詳細を知りたい方、実際にFMO計算結果を解析してみたい方のご参加をお待ちします。

モデレーター： 加藤 幸一郎（九州大学）、高谷 大輔（大阪大学）、大山 達也（理研）

-
- ・ **参加費：** 無料
 - ・ **申込〆切：** 10月17日
 - ・ **定員：** 30名
-