

令和6年度

第2回 超越バイオメディカルDX研究拠点 エクセレントコアセミナー

The 2nd Seminar of the Research Center for Exponential Biomedical DX (Excellent Core)

日 時: 令和6年 9月20日 (金) 15:00 - 16:20

場 所: JAISTイノベーションプラザ 2F シェアードオープンイノベーションルーム

※参加費無料、要予約 (定員30名)



計算科学を活用した機能解明と材料設計に向けた計算手法の開発と応用

石元 孝佳 教授

広島大学大学院先進理工系科学研究科
スマートイノベーションプログラム 計算材料科学研究室

高性能材料の開発や新規機能材料を創出するために、ミクロスケールでの化学・物理現象の理解・解明が求められています。我々は、分子シミュレーションを活用することで、触媒化学、材料科学、生体関連科学など幅広い領域に対する応用研究に取り組んでいます。本発表では、これまで取り組んできた新規計算手法の開発例の他、重水素医薬品や触媒、高分子材料に対する研究成果の概要を紹介します。

BI解析ツールの開発とMI解析への応用

兼松 佑典 助教

広島大学大学院先進理工系科学研究科
スマートイノベーションプログラム 計算材料科学研究室

我々は予めよりバイオインフォマティクス(BI)解析用ツールの開発を行っており、近年はその基盤技術のマテリアルズ・インフォマティクス(MI)解析への活用法を模索しています。本発表ではヘムタンパク質の構造機能相関解析用のオンラインツール「PyDISH」の開発と、ヘム以外の補因子を持つより広範な金属酵素の解析のための拡張について概説した後、そこで用いられた技術を材料開発のために還元する取り組みについて簡単に紹介します。

予約申込先 (9/19ㄨ) : 超越バイオメディカルDX研究拠点 准教授 本郷 研太 (hongo@jaist.ac.jp)