

## 日本化学会情報化学部会 第一回若手の会

日時: 2013年11月9日(土) (前日11月8日 懇親会)

会場: 日本化学会化学会館

〒101-8307

東京都千代田区神田駿河台 1-5

Tel: 03-3292-6161

Fax: 03-3292-6318

アクセス: <http://www.chemistry.or.jp/access/index.html>

コンピュータの発達や扱うデータ・情報の増加とともに、情報化学分野が発展することは言うまでもありません。このような状況において、これからを担う若手研究者の方々の活性化および研究者間の交流増加の促進のため若手の会が発足しました。ご自身の研究フィールドと異なる分野について学び、様々な研究者と触れ合うことで、視野や人脈が広がるとともに異分野間での深い議論に発展することを望んでいます。また今後、例えばある研究室への短期留学、会社や研究所への見学会、情報化学討論会での若手向けセッションなどの企画の立ち上げも視野に入れていきます。学生や企業の若手研究者も大歓迎です。今回のスケジュールの中にショートプレゼンテーションがありますが、ここでの発表の検討もよろしくお願ひします。

スケジュール:

・11月8日(金)

懇親会

場所: 東京周辺 (詳細については追って連絡します。)

時間: 19:00 – 21:00 (変更になる場合があります。その場合は再度連絡します。)

・11月9日(土)

13:00 – 13:10 開会の挨拶

金子 弘昌 氏 (東京大学)

13:10 – 14:00 計算化学の基礎

田中 雅人 氏 (広島大学)

[概要]

コンピュータの発達や計算化学プログラムの整備により、比較的容易に計算化学的な計算を実行できるようになった。計算化学の手法は大きく二つに分けて、分子構造からエネルギーを計算する手法と、分子や分子集団の多数の状態 (構造や配置) を発生させる手法がある。前者には分子力学法や分子軌道法・

密度汎関数法があり、分子の安定構造や性質などを調べることができる。後者にはモンテカルロ法や分子動力学法があり、統計力学に基づいて液体などの分子 集団としての 性質を調べることができる。計算を実行して求めたい情報を得るためには、これらの手法を理解して適切に用いる必要がある。本講演では、計算化学の手法の概要と研究例について紹介する。

14:00 – 14:50 生命ネットワーク分子科学の中心となっている化合物の研究進展と化学情報学の重要性  
Dr. J. B. Brown (京都大学)

[概要]

ポストゲノム時代では様々な生命プロセスに関与するタンパク質が解明されつつあり、各タンパク質を標的とする化合物が開発されてきた。これにより治療法となっている新薬が次々に出ており、quality of life が高まってきた。しかし、「一つのタンパク質に一つの薬」の前提を覆すケモゲノミクスデータが公開され、さらに薬の副作用が数多く報告されている。この背景に次世代の薬は単一のタンパク質を標的にすることなく、複数の高分子がつながる分子ネットワークを考慮した上で設計される必要があると考えられる。そこに各化合物のネットワークにおける情報を有効に活かすことが重要であり、化学情報学技術の進展は不可欠になるであろう。この講演では、ネットワークに作用する分子の設計問題や最新の進展情報などを紹介する。

14:50 – 15:00 休憩

15:00 – 17:00 ショートプレゼンテーション&ディスカッション

[概要]

各人 7 分でショートプレゼンテーションを行う。しっかりとした成果が出ている発表でなくても構わない(むしろ歓迎)。全プレゼンが終わった後に、それらの内容に関してディスカッションを行う。ショートプレゼンの時間 7 分は人数の増減により若干前後する可能性あり。人数が大きく超過する場合はショートプレゼンやディスカッションを複数に分けて並行する。学生を始め多くの若手研究者のプレゼンを歓迎する。

17:00 – 17:10 今後の若手の会について

参加費: 無料

参加者がくつろいで交流や議論を楽しむことを目指しています。  
当日はラフな服装で参加してください(ノーネクタイをお願いします)。

参加登録: 参加およびショートプレゼンを希望する方は、2013年10月18日(金)までに以下のメールアドレスまで参加登録をお願いします。その際に下記の情報を明記してください。

- ・氏名
- ・所属
- ・メールアドレス
- ・電話番号
- ・ショートプレゼンの希望の有無
- ・懇親会参加の有無

(ショートプレゼンを希望する場合)

- ・タイトルおよび概要(150字くらい)
  - \*当日はディスカッションがスムーズに進むよう、簡単なポスター または パワーポイントのスライドを印刷したものをご準備いただけると嬉しいです。

申込みは締切を過ぎても柔軟に対応します。遠慮せず連絡いただければ幸いです。

問合せ・参加申込み連絡先:

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 金子弘昌

E-mail: [hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

Tel: 03-5841-8837