

MOE Forum 2018

ウェブアプリケーション
バーチャルリアリティ

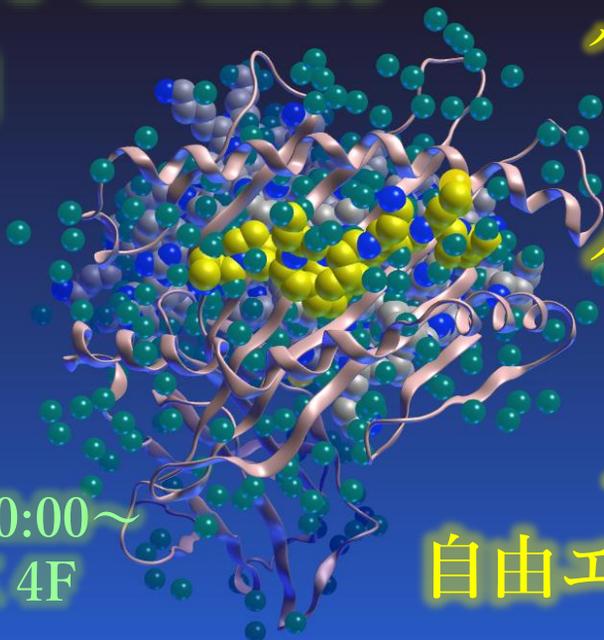
創農薬 SBDD

インシリコ創薬

AI MD

メディシナルケミスト

自由エネルギー計算



7/11 Wed 10:00~
秋葉原UDX 4F



日時 2018年 7月 11日 (水) 10:00~17:30 (開場 9:30)
会場 秋葉原UDX 4F NEXT-2 秋葉原駅電気屋街口から徒歩3分
参加費 無料 対象 創薬ならびに生命科学分野等のご研究者様

創薬・生命科学研究に最適な分子設計環境MOEの最新情報、応用事例の紹介

MOE フォーラムでは、MOEの開発責任者から、計算化学分野における最新の基礎研究の成果を紹介します。また、創薬、生命科学分野の第一線でご活躍されている先生方をお招きし、MOEを利用されたご研究成果を発表して頂きます。更に、今回は、バーチャルリアリティ・ディスプレイzSpace(*1)を展示します。皆様のご参加を心よりお待ちしております。

*1) <http://jp.zspace.com/>

MOE最新情報

MOEsaic: Application of Matched Molecular Pair Analysis to Interactive SAR Exploration

Chemical Computing Group
Executive Vice President, Elizabeth Sourial

Free Energy Calculations with Thermodynamic Integration in MOE using AMBER

Chemical Computing Group
President, CEO, Paul Labute.

招待講演

創薬支援研究におけるインシリコ技術の活用事例の紹介

国立研究開発法人産業技術総合研究所 広川 貴次

構造生物学解析が拓く、特徴的PPAR γ アゴニストへの合理的構造転換

東京大学 宮地 弘幸

分子設計におけるAI活用の動向と将来展望

アステラス製薬株式会社 藤 秀義

硝化抑制剤の構造ベース創薬

国立研究開発法人農業・食品産業技術総合研究機構 西ヶ谷 有輝

時間	プログラム
10:00~10:10	ご挨拶
10:10~10:25	MOEイントロダクション
10:25~11:05	創薬支援研究におけるインシリコ技術の活用事例の紹介
11:05~11:45	MOEsaic: Application of Matched Molecular Pair Analysis to Interactive SAR Exploration
11:45~12:15	実験研究者のためのMOE/webアプリケーション
12:15~13:25	ランチ & zSpace体験
13:25~14:05	構造生物学解析が拓く、特徴的PPAR γ アゴニストへの合理的構造転換
14:05~14:45	分子設計におけるAI活用の動向と将来展望
14:45~15:05	休憩 & zSpace体験
15:05~15:30	タンパク質立体構造情報データベースシステムPSILO: 新機能
15:30~16:10	硝化抑制剤の構造ベース創薬
16:10~16:50	Free Energy Calculations with Thermodynamic Integration in MOE using AMBER
16:50~17:30	MOE next release Overview

※ プログラムは、予告なく変更される場合があります。予めご了承ください。

ご参加登録: www.molsis.co.jp/seminar/moe_forum2018/
株式会社モルシス Tel: 03-3553-8030 E-mail: moe@molsis.co.jp

