

授業情報 / Class Information

<< 2024年度シラバス（最終更新日：2024年02月27日） >>

基本情報 / Basic Information

詳細情報 / Detailed Information

授業計画詳細情報 / Class Schedule Details

基本情報 / Basic Information

| | |
|--|--|
| 開講科目名 / Course | ドラッグデザイン特論 / Basics on Practical Drug Design |
| 時間割コード / Course Code | 47240-59 |
| 共通科目コード / Common Course Code | GFS-MJ7D09L1 |
| 学部 / 大学院 / Undergraduate / Graduate | 大学院 / Graduate |
| 開講所属 / Course Offered by | 新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻 / Graduate School of Frontier Sciences Computational Biology and Medical Sciences |
| ターム・学期 / Term・Semester | 2024年度 / Academic Year A 1 / A1 |
| 曜限 / Day, Period | 集中 / Int |
| 開講区分 / semester offered | A1A2 / A1A2 |
| 単位数 / Credits | 2.0 |
| 学年 / Year | M1/M2/D1/D2/D3 |
| 他学部履修 / Available to students in other faculties | 可 |
| 備考 / Notes | |
| 主担当教員 / Main Instructor | 広川 貴次、齋藤 裕 |
| 教室 / Classroom | |

担当教員情報 / Instructor Information

| 教員名 / Instructor | 教員所属名 / Affiliation | 職名 / Job Title |
|---------------------|------------------------|-------------------|
| 広川 貴次 | メディカル情報生命専攻 | |
| 齋藤 裕 | メディカル情報生命専攻 | |
| 伊藤 耕一 | メディカル情報生命専攻 | 教授 |
| 浅井 潔 | メディカル情報生命専攻 | 教授 |
| 木立 尚孝 | メディカル情報生命専攻 | 准教授 |

閉じる / Close

基本情報/Basic Information

詳細情報/Detailed Information

授業計画詳細情報/Class Schedule Details

講義題目
/Subtitle授業の目標、概要
/Course Objectives/
Overview授業情報
/Class information授業のキーワード
/Keywords授業計画
/Schedule授業の方法
/Teaching Methods成績評価方法
/Grade Evaluation教科書
/Textbook参考書
/Reference履修上の注意・準備学習等(予習、
復習)
/Notes on Taking the Course
/Assignments / Instructions
for Preparation and Review関連ホームページ
/Course-Related Websitesその他
/Others

本講義では、バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスによる創薬研究の目的・原理・現状を理解することを目標とします。タンパク質立体構造に基づく医薬品探索 (Structure-based drug design)、化合物情報に基づく医薬品探索 (Ligand-based drug design) の基礎を学び、蓄積・共有されつつある遺伝情報・構造生物学の膨大なデータを活用する機械学習による生体分子設計を紹介します。

日本語用
/Japanese

ドラッグデザイン、創薬インフォマティクス、機械学習

英語用
/English

drug design, drug discovery informatics, machine learning

【講義日程・担当】

木曜4, 5限 (14:55-16:40, 16:50-18:35) のうち、以下の日程・担当で講義を行う。

11月7日 広川

11月28日 広川

12月12日 広川

12月19日 齋藤

1月9日 広川

1月23日 広川

【講義内容】

広川担当分

1. 化合物情報に基づく医薬品探索

分子表現と類似性検索

化合物データベース

記述子による薬らしさの表現、ファルマコフォア、最適化手法

2. タンパク質立体構造に基づく医薬品探索

Pre-Docking (レセプターモデリング、分子動力学、標的タンパク質同定)

Docking (探索/スコアリング、Induced-Fit、バーチャルスクリーニング)

Post-Docking (ポーズ判定、高精度エネルギー計算、相互作用フィンガープリント)

3. 応用事例解説

タンパク質-タンパク質阻害剤探索、ドラッグリポジショニング等

齋藤担当分

4. 機械学習による生体分子設計

機能性タンパク質の設計

mRNAの設計 (翻訳効率の向上)

プロモーターDNAの設計 (転写活性の向上)

オンライン講義を行う。

出席、小テスト、およびレポートによる。

特に定めない

特に定めない

オンライン講義を予定している。

オンライン講義URLは変更されることがあるので、毎回確認して参加すること。

2019年度の情報生命科学特別講義Ⅲを履修して単位を取得したものは、本科目を履修できない。

Language Used in Class

優評価「上位3割」適用科目

適用しない/Not apply

Grading guidelines subject

後期教養教育科目

Liberal Arts Education for Undergraduate (Senior Division) & Graduate Students

該当科目でない/Course not applicable

LMS連携有無

LMS連携有/Link

LMS link or not

オンライン授業URL

Online Class URL

オンライン授業内容

Online Class Information

授業実施形態

オンライン型 (オンラインのみで実施) /Fully Online: All classes conducted online

Course delivery modalities

閉じる/Close