

第1回 インシリコ創薬講習会『myPresto』

日時：2012年6月7日（木）14:00～17:00

場所：公益財団法人都市活力研究所 セミナー室

講師：株式会社日立東日本ソリューションズ 三上氏

内容：

【第1部】（14:00-16:00）

- ・機能概要の説明
- ・スクリーニングの作業手順
化合物 3D データ、蛋白構造準備、プローブ点、ドッキング、
可視化、入出力ファイルについて
- ・個々のモジュールの操作概要（スクリプト、パラメータ設定など）
- ・大規模化合物ライブラリを利用したスクリーニング
（MTS 法、DSI 法など）

【第2部】（16:00-17:00）

- ・個別相談（希望者）

第2回 インシリコ創薬講習会『Platypus-QM/MM』

日時：2012年7月6日（金）15:00～17:00

場所：公益財団法人都市活力研究所 セミナー室

講師：大阪大学蛋白質研究所 中田氏

内容：

【第1部】（15:00-16:00）

- ・機能概要の説明
- ・操作手順
化合物準備手順、蛋白構造準備手順、入出力ファイルについて
- ・個々のモジュールの操作概要（スクリプト、パラメータ設定など）
- ・実際の計算事例
- ・質疑応答

【第2部】（16:00-17:00）

- ・個別相談（希望者）

※お問合せ： NPO法人バイオグリッドセンター関西

（講習場所）（公益財団法人都市活力研究所内）

〒530-0001 大阪市北区梅田一丁目12番39号 新阪急ビル9階

電話 06-6344-2665 fax 06-6344-2668

担当： 志水隆一（shimizu@urban-ii.or.jp）

味村和洋（mimura@urban-ii.or.jp）