## 横断的分野 (タンパク質構造)執筆分担案

- x. 分野横断的課題
  - x. x. タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析
  - x. x. 1 タンパク質構造に関する分野横断の意義 (イントロのようなもの) 担当:池口、藤堂
    - ▶「生命科学」「物質科学」「ものづくり」分野の境界に位置した横断的課題である.
    - ▶ ここでは、代表的な例を挙げつつ、分野横断の意義を説明する.
  - x. x. 2 創薬シミュレーション 担当:山下、北浦
    - ▶ 物質科学・生命科学の境界からみたときの「創薬」について語る.
    - ➤ 量子化学(FMO, QM/MM), 統計力学的アプローチ(MD)など...
  - x. x. 3 バイオナノ境界ものづくりシミュレーション 担当:望月、山崎
    - ➤ 生体親和性の高い医療用インプラント、アパタイトなどのバイオミネラリザーション、 人造抗体、DNAを利用した医療用診断センサー等のバイオセンサー
  - x. x. 4 ウイルスや細胞動態などの巨大系シミュレーション 担当:吉井、杉田
    - ▶ 次世代スパコンが実現できると、巨大な系からなる生命現象のまるごとシミュレーションが可能になってくる。

## 横断的分野:蛋白質科学会でのシンポジウム

- 日本蛋白質科学会
  - 蛋白質に関わる実験・理論研究者の学会
  - 2013年6月12日(水)~14日(金) 鳥取
- エクサフロップス時代の計算蛋白質科学
  - -6月12日(水) D会場(150席予定)
    - ▶池口満徳(横浜市立大学)全体概要説明
    - ▶杉田有治(理化学研究所)細胞系計算
    - ▶吉井範行(名古屋大学)ウイルス巨大系計算
    - ▶山下雄史(東京大学)創薬計算
    - ▶望月祐志(立教大学)バイオセンサー等設計