



私がこの課題の代表者です

支援メニューはこちらを Click!

課題番号・課題内容

C1-1 タンパク質の動的構造解析

横浜市立大学 生命医科学研究科 教授/理化学研究所 計算科学研究センターユニットリーダー

いけぐち みつり

池口 満徳 先生

Mitsunori Ikeguchi

東京大学大学院卒。博士（農学）。東京大学助手を経て、横浜市立大学に赴任、現職  
タンパク質立体構造の計算の分野で仕事をしてきました。プログラミングは好きですが、最近はその時間がとれないのが悩みです。

### 今までに主に取り組んできた研究

これまで、タンパク質の立体構造に基づく分子シミュレーションの研究に従事してきました。最近では、BINDS で提供されている化合物データベースを用いたインシリコスクリーニングも行っています。このところ、AI によるタンパク質の立体構造予測が急速な進展を遂げ、私も大きな関心を持っています。これまで、数十年、タンパク質立体構造に関わる計算を主に取り組んできましたが、これほどタンパク質立体構造予測が高精度になるとは予想していませんでした。このユニットでは、AI も活用して、支援・高度化を行っています。メインとなる支援・高度化は分子シミュレーションで、物理化学に基づき、分子の動的構造等を研究しており、AI とは相補的な役割だと思っています。今後の生命科学・創薬研究では、分子シミュレーションと AI 活用が進み、いろんなタンパク質の自在設計など、驚くようなことが実現できるのではと期待しています。



富士山の麓にて。



横浜市立大学 生命医科学研究科

てらやま けい

寺山 慧 先生

Kei Terayama

京都大学大学院人間・環境学研究科にて博士取得。東京大学大学院特任研究員、理化学研究所特別研究員および京都大学大学院特定助教を経て現職。AI・機械学習による分子設計やシミュレーションの高度化に取り組んでいます。



横浜市立大学 生命医科学研究科

えきもと とおる

浴本 亨 先生

Toru Ekimoto

九州大学大学院卒。理学博士。ドッキングシミュレーションや分子動力学シミュレーションの実行と解析を担当します。実験と共同した支援案件を得意としています。



横浜市立大学 生命医科学研究科

きでら あきのり

木寺 詔紀 先生

Akinori Kidera

20 年に退職し、現在は特任で池口教授のグループの一員です。長くタンパク質の計算機による研究をしてきましたが、ここ数年でようやくそれぞれのタンパク質の立体構造と向き合うことができるようになったと感じています。個々のタンパク質の立体構造は、その背景の機能を含めて大量の情報を含みますが、それに溺れることを厭わなくなった、さらには面白いと感じることができるようになったということだと思っています。



横浜市立大学 生命医科学研究科

いのうえ まさお

井上 雅郎 先生

Masao Inoue

九州大学大学院卒。学生時代は物理学を専攻し、液体の統計力学理論を用いた数値計算研究に従事。博士研究員として働き始めてから生物物理の分野に足を踏み入れました。現在は主に分子動力学シミュレーションを用いた構造生物学の研究を行っています。スーパーコンピュータ「富岳」を使った大規模計算の経験があります。



大阪公立大学  
大学院理学研究科生物化学専攻

もりつぐ けい

森次 圭 先生

Kei Moritsugu

分子シミュレーションの手法開発を行ってきましたが、現所属（大阪公立大学理学部生物化学科）が生物系なこともあり、細胞内で機能するタンパク質の構造モデリングとシミュレーションによる実証にも最近では取り組んでいます。趣味は旅行。

