

分子性触媒におけるインフォマティクス

講師：山口滋氏

理化学研究所環境資源科学研究センター 上級研究員

NMR や X 線結晶構造解析など、分子の構造・性質をより深く知るための分析技術は新しい研究分野の創出および既存の研究分野の深化につながる。たとえば DNA の X 線回折像はその 2 重らせん構造の提唱へとつながり、分子生物学の幕開けとなった。また NMR は本セミナーの主題である有機化学分野では分子の同定に不可欠であり、NMR がなければ現代有機化学の土台が崩れると言っても過言ではない。ここで現代科学の強力な分析技術としてデータ科学がある。本セミナーではとくに分子性触媒の科学を深化し得る強力な分析技術としてのデータ科学について線形回帰分析を中心に取り上げる。データ駆動型分子設計の事例ならびにその背景となる知識を紹介する。

【講師経歴】2006 年 京都大学理学部卒業、2011 年 京都大学大学院理学研究科化学専攻 博士課程修了、2011 年 東京大学理学系研究科化学専攻 特任助教、2012 年 UCR および UCSD JSPS 海外特別研究員、2013 年 京都大学大学院薬学研究科医薬創成情報科学専攻 博士課程、2015 年 理化学研究所環境資源科学研究センター 特別研究員、2017 年 理化学研究所環境資源科学研究センター 基礎科学特別研究員、2020 年 理化学研究所環境資源科学研究センター 上級研究員【所属学会】日本化学会

開催日時	2021 年 2 月 15 日 (月) 13:30~16:30	※本セミナーは、当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。推奨環境は当該ツールをご参照ください。後日、視聴用の URL を別途メールにてご連絡いたします。 詳細は裏面をご覧ください。
受講料	40,000 円 + 税 ※ 資料付 * メルマガ登録者 36,000 円 + 税 * アカデミック価格 24,000 円 + 税	

*アカデミック価格:学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2 名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2 名目は無料、3 名目以降は半額です。

★【セミナー対象者】有機低分子とくに有機反応や分子性触媒のデータ解析に興味があり、反応データ等からどのようにすれば有用な情報が抽出できるかに関して事例および背景知識を知りたい方。★【得られる知識】・有機低分子のデータ科学とくに不斉触媒反応の回帰分析に関する背景および現状・分子性触媒の線形回帰分析により抽出できる情報について・PLS や LASSO、Elastic Net といった線形回帰手法・比較分子場解析に代表される 3 次元定量的構造活性相関手法を用いた不斉触媒反応の回帰分析、重要構造情報の可視化および分子設計

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- | | |
|---|-------------------------------------|
| 1. はじめに | 3. 3. 自由エネルギー関係に基づく不斉触媒のデータ駆動型設計の事例 |
| 2. 有機化学における回帰分析 (自由エネルギー関係) | 3. 4. 非線形回帰手法による分子性触媒の解析事例 |
| 2. 1. 電子的効果をあらわす記述子を用いた回帰分析 | 4. 分子場解析に基づく不斉合成におけるデータ駆動型触媒設計 |
| 2. 2. 立体効果をあらわす記述子を用いた回帰分析 | 4. 1. 分子場解析 (3D-QSAR) |
| 2. 3. QSAR への発展と 2 つの QSAR | 4. 2. 不斉触媒反応における分子場解析 |
| 3. 分子性触媒における回帰分析 | 4. 3. 分子場解析に基づくデータ駆動型触媒設計の事例 |
| 3. 1. 不斉触媒反応の回帰分析への古典的記述子の応用 | |
| 3. 2. 古典的記述子から modern physical organic descriptor へ | |

弊社記入欄	ウェビナー申込書		
セミナー名	分子性触媒におけるインフォマティクス		
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○↓	会社名 (団体名)	TEL :	
	住所 〒	FAX :	
		E-mail :	
会員登録済み	新規登録希望	部署	役職
お支払方法		銀行振込・その他	氏名
		お支払予定	202 年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail (re@cmcre.com) でお申し込みください。
 ■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしておりません、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。
 ■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町 2-7 TEL 03-3293-7053
 ■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

2021年2月15日（月）開催

分子性触媒におけるインフォマティクス

講師：山口滋氏

理化学研究所環境資源科学研究センター 上級研究員

当該セミナーは、**ライブ配信のウェビナー（オンラインセミナー）**です！

【ライブ配信対応セミナー】

- 本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。お申し込み前に、下記 URL より視聴環境をご確認ください。
→ <https://zoom.us/test>
- 当日はリアルタイムで講師へのご質問も可能です。
- タブレットやスマートフォンでも視聴できます。
- お手元の PC 等にカメラ、マイク等がなくてもご視聴いただけます。この場合、音声での質問はできませんが、チャット機能、Q&A 機能はご利用いただけます。
- ただし、セミナー中の質問形式や講師との個別のやり取りは講師の判断によります。ご了承ください。
- 「Zoom」についてはこちら↓をご参照ください。

<https://zoom.us/jp-jp/meetings.html>

【お申込み後の流れ】

- 開催前日までに、ウェビナー事前登録用のメールをお送りいたします。お手数ですがお名前とメールアドレスのご登録をお願いいたします。
- 事前登録完了後、ウェビナー参加用 URL をお送りいたします。
- セミナー開催日時に、参加用 URL よりログインいただき、ご視聴ください。
- 講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみのご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固く禁じます。
- 資料を冊子で配布する場合は、事前にご登録のご住所に発送いたします。開催日時に間に合わない場合には、後日お送りするなどの方法で対応いたします。

【注意事項】

- 本セミナーの受講にあたっての推奨環境は「Zoom」に依存します。受講者の方のお手元の PC などの設定や通信環境が受信の状況に大きく影響いたしますので、ご自分の環境が対応しているか、お申し込み前の確認をお勧めいたします。

<https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC->

[MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6](#)

- Zoom クライアントは最新版にアップデートして使用してください。
- インターネット経由でのライブ中継ですので、回線状態などにより、画像や音声がかかる場合があります。また、状況によっては、講義を中断し、再接続して再開する場合がありますが、予めご了承ください。
- 万が一、当社や講師側（開催側）のインターネット回線状況や設備機材の不具合により、開催を中止した場合には、受講料の返金や、状況により後日録画を提供すること等で対応させていただきます。
- 本セミナーはお申し込みいただいた方のみ受講いただけます。複数端末から同時に視聴することや複数人での視聴は禁止いたします。
- 受講中の録音・撮影等は固く禁じます。
- Zoom のグループにパスワードを設定しています。お申込者以外の参加を防ぐため、パスワードを外部に漏洩しないでください。
万が一外部者が侵入した場合は管理者側で部外者の退出あるいはセミナーを終了いたします。