

第8回 情報生命科学特別講義 2011年11月25日(金)

Molecular simulation of biomolecules
- Toward the computer-aided drug design -
生体高分子の分子シミュレーション - 計算機支援創薬に向けて -

Atsushi Suenaga / 末永敦

National Institute of Advanced Science and Technology (AIST)
Computational Biology Research Center (CBRC)
産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター

During the 1980s, advances in the abilities to perform molecular simulations of chemical and biomolecular systems led to the expectation that such methodology would soon show great utility for guiding molecular design. Here, I will lecture on the basic of molecular simulation of biomolecules, and consider a question "Is there really a case where a drug was designed by a computer?"

1980年代に、生体高分子の分子シミュレーションの能力は大幅に向上し、計算機による分子デザインへの期待が高まってきている。本講義では、分子シミュレーションの基礎について解説し、計算機支援創薬への応用について考える。