



第7回 2013年11月22日(金) 14:50~15:40

Molecular Dynamics Simulation for Biomolecules

生体系への分子動力学法の適用

Tomoshi Kameda / 亀田 倫史

Computational Biology Research Center (CBRC)

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター

I talk about some case studies in the drug discovery process using the molecular dynamics simulation. For example, I report that development of the dissolving agent of poor solubility compound, amyloid fibril and carbon nanotube. And, I discuss the advantage and disadvantage of the molecular simulation.

Keywords: Molecular Dynamics, simulation, protein, nucleic acid, drug

創薬過程における分子動力学法の利用法を、具体的な事例を元に講義する。例えば、分子動力学法を用いて難溶性薬物、アミロイド繊維、カーボンナノチューブ溶解剤を開発した事例を紹介する。これらを通じて、分子動力学法の利点と欠点を論ずる。

キーワード: 分子動力学法、シミュレーション、タンパク質、核酸、薬物