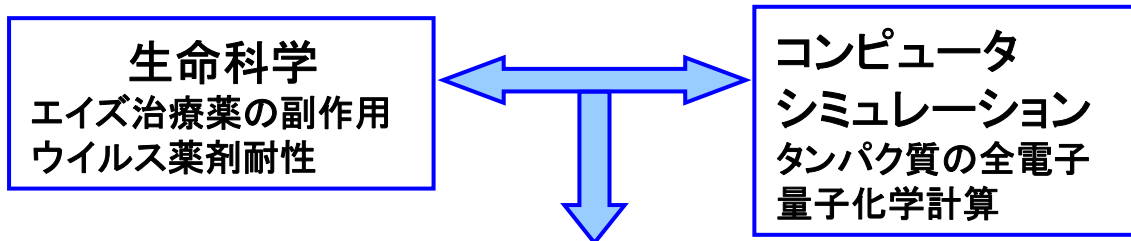


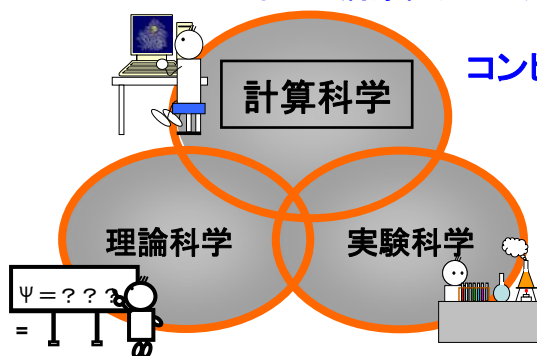
岡山理科大学 直島好伸 研究室

生体分子の量子化学計算: エイズウイルス治療薬の効果と副作用およびウイルス薬剤耐性に関する計算シミュレーション

Keywords : 生命科学・生命分子計算・量子化学計算・生命機能・創薬



◆生命を司る生体分子に関する研究の一環として、従来の理論、実験と言った手法に加え、科学技術の第3の方法論としての地位を築いているコンピュータシミュレーションの最先端の手法を取り入れた研究を進めている一例えば、「エイズやアルツハイマーなどの病原性タンパク質とその治療薬に関する量子化学計算」。



コンピュータシミュレーション(計算科学)

- ・実験が困難なモデルを構築
- ・現象の本質を解明、理解

@製品開発期間の短縮

@ものづくりのイノベーション

~研究成果を社会に発信・還元する~

◆ものづくりのイノベーションを支える 革新的 シミュレーションソフトウェア

BioStation タンパク質-化学物質相互作用解析 量子化学計算

AMBER 9 生体分子 分子力学および分子動力学計算

Gaussian 03 有機化合物 量子化学計算

◆ものづくりのイノベーションを支える 次世代 コンピュータマシン

Xeon、**Itanium 2** および **Core 2 Duo** 64 bit クラスタ型計算機システム

◆共同研究の事例◆

ものづくりのイノベーションへ向けた最新シミュレーション

- 分子モデリングシミュレーションによる高付加価値アズレン化合物の設計と開発
- 分子計算シミュレーションによるオリゴ糖の特性評価と開発に関する研究
- タンパク質と化学物質の相互作用に関する量子化学計算