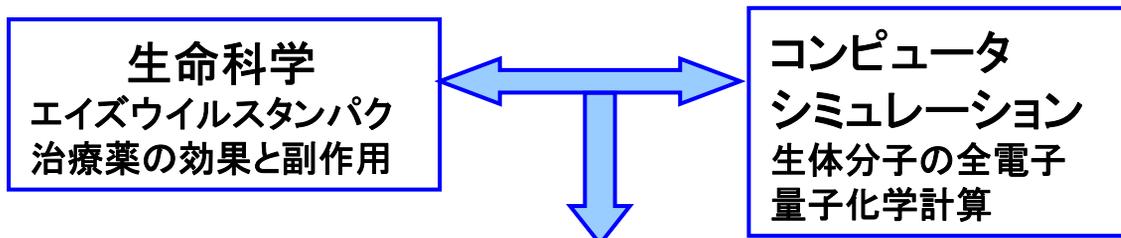


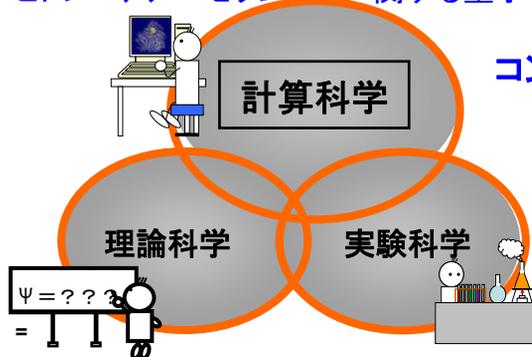
岡山理科大学 直島好伸 研究室

エイズ治療薬の開発と効能評価に向けた 医薬品分子シミュレーション

Keywords : 生命科学・生体分子・量子化学計算・エイズ・医薬



◆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計算手法を用い、《エイズウイルスプロテアーゼタンパクとヒトプロテアーゼタンパクに関する量子化学計算を行っている》



コンピュータシミュレーション(計算科学)

- ・分子・物質シミュレーション
- ・地球環境シミュレーション
- ・人間社会シミュレーション

イノベーションの加速

～具体的な研究技術課題の解決～

◆バイオ研究に必要な不可欠な革新的シミュレーションソフトウェア

AMBER 生体分子 分子力学および分子動力学計算

BioStation 生体分子量子化学計算 フラグメント分子軌道法

Protein DF タンパク質の全電子量子化学計算 タンパク質密度汎関数法

◆バイオ研究に必要な不可欠な次世代コンピュータマシン

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

生命・医薬・バイオの分子計算シミュレーションに関する学会

■情報計算化学生物学会

■日本バイオインフォマティクス学会

■日本シミュレーション学会

■日本コンピュータ化学会

■日本化学会情報化学部会

◆エイズウイルスタンパクの量子化学計算の紹介◆

「はじめての生命科学」第四章 三共出版 2009年春 印刷中