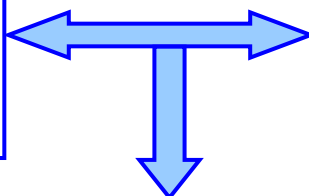


岡山理科大学 直 島 好 伸 研究室

ウイルスとの闘いーエイズ治療薬の開発と効能評価のための生体分子化学計算シミュレーション

Keywords : シミュレーション・生体分子・生命科学・エイズ・医薬

生命科学
エイズウイルスタンパク質
エイズ治療薬の効果
と副作用

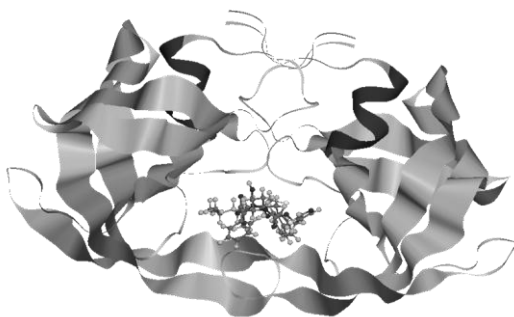


**コンピュータ
シミュレーション**
生体分子量子化学計算

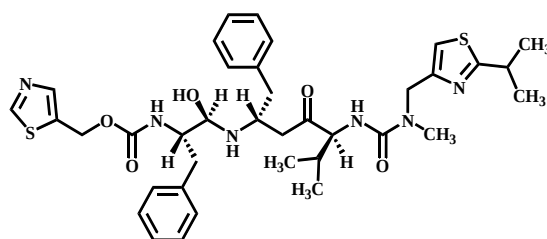
◆科学技術の第3の方法論としての地位を確立しているコンピュータ シミュレーションの最先端の計算手法を用い、エイズウイルスプロテアーゼタンパク質と人間のヒトプロテアーゼタンパク質におよぼすエイズ治療薬の影響を検討した。

◆生体分子量子化学計算で得られたエネルギー値とエイズ治療薬の効果や副作用についての臨床的な値との間に相関性を見出した。

～エイズ治療薬としての効果が高い(副作用も大きい)リトナビルは、効果の低い(副作用は小さい)サキナビルよりも結合エネルギーが大きい～



リトナビルによりエイズタンパク質の働きを阻害する



エイズ治療薬 リトナビル

◆バイオ研究に必要不可欠な 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

ABINIT-MP/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

◆エイズウイルスタンパク質の量子化学計算の紹介◆

生命情報科学と生命科学ーコンピュータで生体分子を解析するー

「はじめての生命科学」第4章 三共出版 2009年