

# 分子シミュレーションを活用した インシリコ創薬

講師：広川貴次 先生

産業術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター  
理論分子設計チーム チーム長

日時：7月23日（木）14:45-16:15

会場：北海道大学薬学部第二講義室

主催：北海道大学薬学研究院創薬化学研究教育センター  
日本薬学会北海道支部

共催：未来創薬・医療イノベーション拠点形成

「京」コンピュータに代表されるような大規模計算環境の発展と分子動力学計算を中心とした分子シミュレーション技術が相俟って、インシリコ創薬による開発プロセスの効率化と革新的な創薬支援が期待されている。特に、分子動力学計算は、標的タンパク質の動的構造の解析、高精度結合自由エネルギー計算、化合物作用機序解析などに活用されており、創薬支援研究に欠かせない要素技術となっている。本講義では、分子動力学計算を活用したインシリコ創薬を概説し、国内外の動向、そして実際の活用事例などを紹介する。

連絡先：薬学研究院創薬有機化学研究室

周東 智

(内) 3769

shu@pharm.hokudai.ac.jp