

理研イブニングセミナーは、理研の研究を産業界に伝え、連携を推進することを目的としています。

第66回

# 理研 イブニングセミナー

参加無料



## スパコンが拓く！ 未来創薬 みらいそうやく

現在、世界中で開発される新薬は年間たったの30種程と言われます。新薬の開発コスト高騰と承認率の低下は深刻な問題で、医薬品開発の効率化は喫緊の課題です。

薬剤は、標的タンパク質に結合しその機能を調整することで、病気の進行を抑えます。標的タンパク質に強く結合する化合物をいかに効率良く見つけ出すかが創薬プロセスの鍵となります。

計算機は、標的タンパク質の形状を基に、結合ポケットに合致する候補化合物を高速に探索するのに用いられますが、予測精度は高くありません。

私たちは、スパコン利用を念頭に国産ソフトウェア「GENESIS」をスクラッチから開発し、「京」コンピュータを用いて1億原子以上の細胞スケールシミュレーションを実現しました。

タンパク質と薬剤の構造も $10^{-10}$ メートル精度で予測、結合・解離を100回程度観測するなど、世界的に例のない規模の計算が可能になりました。本講演では、「GENESIS」を用いた次世代創薬への取り組みを実例を交えて紹介します。

発表者 **李秀栄** (リスヨン)

生命機能科学研究センター  
分子機能シミュレーション研究チーム  
(杉田有治チームリーダー) 上級研究員



研究チームの紹介ページ ⇒



2019. 06.05 (水)  
17:30 - 18:30

### 【会場】

健康“生き活き”羅針盤リサーチコンプレックス  
三宮拠点「iKaFe (あいかふえ)」  
(神戸市中央区雲井通5-3-1 サンパル7F)



### 【お申込】

理化学研究所 イブニングセミナー事務局 担当:神吉  
Email: [evening-seminar@riken.jp](mailto:evening-seminar@riken.jp)

件名を「6/5 理研イブニングセミナー参加申込」とし、  
お名前・ご所属・連絡先アドレスをご記入のうえ、  
メールでお手続きください。

<主催> 理研 イノベーション事業本部 企業共創部  
理研 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム  
<共催> 神戸商工会議所