

# 統合化コンピュータ化学システムによる薬学研究へのアプローチ Integrated Computational Chemistry Approach toward Pharmaceutical Studies

○宮本 明<sup>1</sup>(<sup>1</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター)

生体内における薬物動態・薬効の予測が可能であり、そのことにより創薬プロセスの促進が望まれる。計算化学手法は、21世紀の創薬プロセスにおける必須の手法として大きな期待が寄せられている。我々はこれまでに、産業界で必要とされている複雑な系に対して計算化学手法を実践的に役立てることを第一の目標として、図1に示す様々な独自の計算化学プログラムの開発に成功してきた。また、それら開発プログラムのエレクトロニクス・セラミックス・電池・触媒・トライボロジー等様々な分野における実践的な系への適用を実現してきた。

これまでに開発してきた計算化学プログラムの生体内における薬物の吸収・拡散・透過・タンパクとの相互作用・代謝ダイナミクスへの応用事例及び将来展望について発表する。

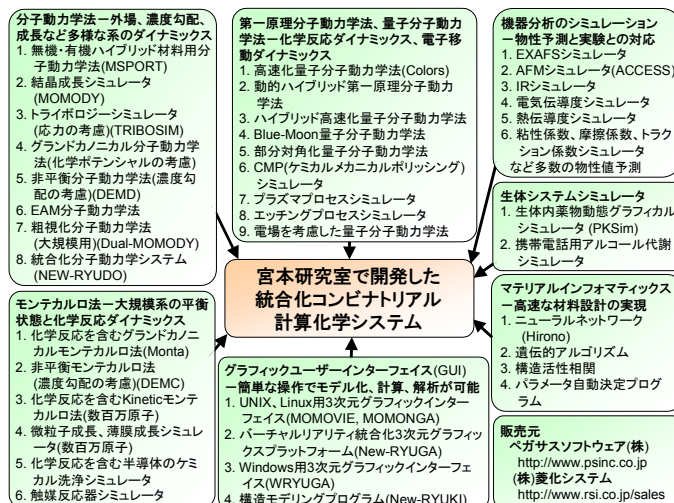


図1 宮本研で独自に開発したソフトウェア群