

分子設計トータルシステムの開発

船津 公人
豊橋技術科学大学

本研究室では、分子設計や構造活性相関に関連する手法の研究およびそれに対応するコンピュータソフトウェアの開発を行っている。これらのソフトウェアには本研究室で独自に開発されたものも含まれており、互いに連携することで分子設計研究に効果を発揮するものと考えられる。そこで今回これらのソフトウェアを統合し、共通のインターフェイスによって分子設計に関する様々な解析を行うための、分子設計トータルシステムの開発を行った。このトータルシステムを用いることで、分子構造の重ね合わせ、3D-QSAR モデルの作成、LigConstructor による薬物候補構造の自動生成などの解析を行うことが可能である。