

重庆大学药学院

学术报告第一百四十五讲

报告题目：生物体系多尺度理论研究的方法发展及应用

报告人：李国辉 研究员（中科院大连化物所）

时 间：2018年8月24日（周五）10:00

地 点：重庆大学药学院学术报告厅

报告人简介：

1990.09–1997.06 辽宁师范大学 物理系 学士、硕士

1997.09–2000.06 中科院大连化物所 博士

2000.07–2001.07 美国新墨西哥大学 化学系 博士后

2001.08–2003.12 美国威斯康星大学 化学系 博士后

2004.01–2006.03 美国哈佛大学 医学院 博士后

2006.03–2009.03 美国 Biogen Idec Inc. 研发部 Scientist

2009.3–至今 中科院大连化物所、中科院百人计划研究员、博导

2016.9–至今 分子反应动力学国家重点实验室 副主任

国家杰出青年基金获得者、中国生物物理学会理事、中国化学会理论化学、生物物理化学、化学生物学专业委员会委员



报告摘要：

生物系统虽然由简单的氨基酸、核酸组成的大分子体系和小分子环境组成，但是由于它们排列组合空间巨大，使得它们之间的相互作用也是异常之复杂多样。现有的实验技术手段由于采用其他分子或外力作为辅助，导致所观察到的结果与真实生物学现象之间有很大差距，分子动力学模拟弥补了这些实验的局限性。尽管分子动力学模拟

已经取得了一定成功，但是对于生物学研究来讲它能够解析或回答的问题还很有限，除了生物体系本身的复杂性之外，更重要的是现有分子动力学模拟理论方法本身还存在着很多不足之处，无法实现中小体系的高精度模拟以及高效率研究巨大复杂体系，我们近几年在高精度分子模型和高效率模拟方法方面取得了一定进展。并针对重大疾病开展了相关药物筛选与设计以及生命科学领域重要体系功能机理的应用研究，取得了重要成果，在 Nature, Science, Mol. Cell 等杂志发表 100 余篇研究论文。