

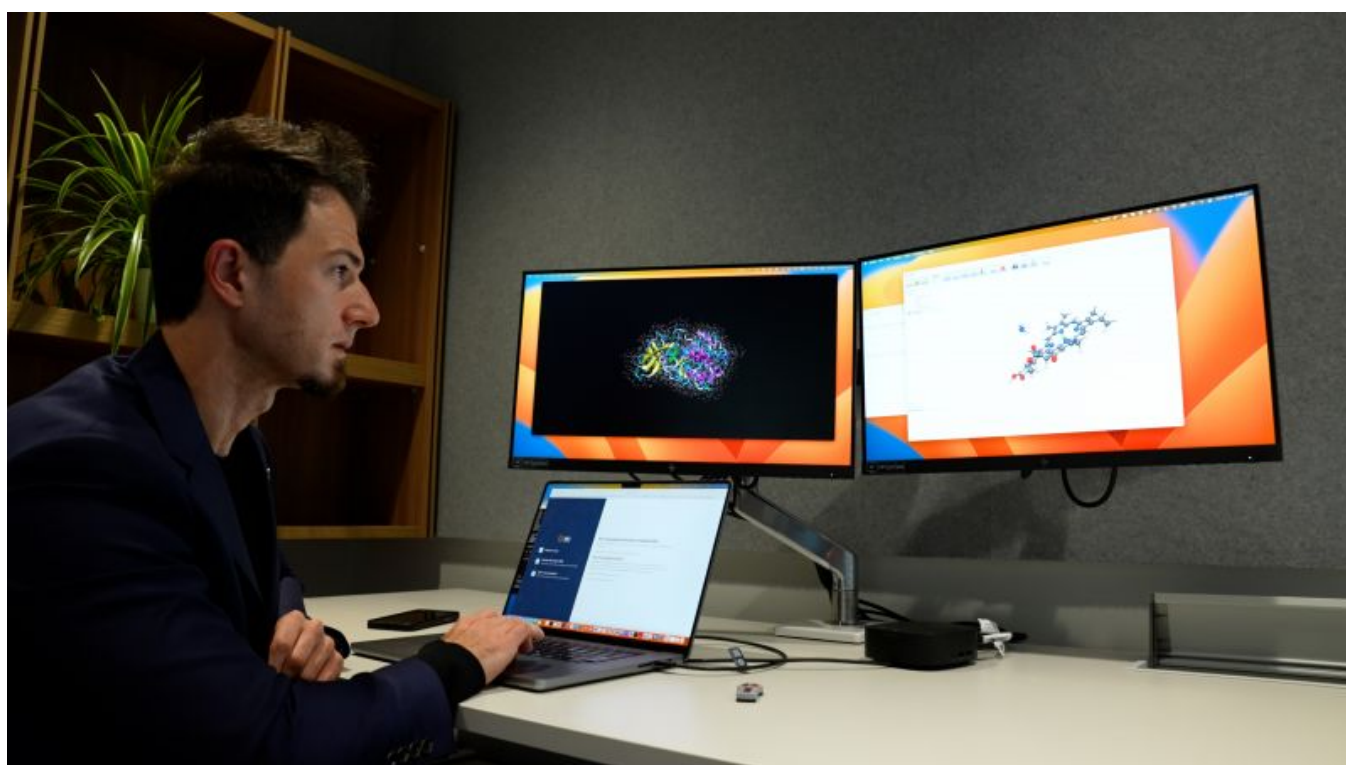
生物系统量子模拟首次实现，对分子行为精准预测有助新药研发

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/28687.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

生物系统量子模拟首次实现，对分子行为精准预测有助新药研发。据澳大利亚墨尔本大学官网报道，该校理论家和高性能计算专家朱塞佩·巴卡副教授领导的团队，首次实现了生物系统的量子模拟，其规模足以准确模拟药物性能。团队利用美国前沿超级计算机的计算能力，开发出新软件，能准确预测由多达数十万个原子组成的分子系统的化学反应和物理性质，对分子行为提供高度精确的预测，并为计算化学树立了新的标杆。



朱塞佩·巴卡团队首次实现了生物系统的量子模拟。图片来源：墨尔本大学官网

该项目汇集了化学、药物研发、量子力学和超级计算方面的专业知识，由美国橡树岭国家实验室、AMD和科技初创公司QDX共同合作完成。

这项突破性研究历时4年多，首次实现了以量子级精度研究生物分子级系统。这种模拟能力使科学家能以前所未有的细节观察和理解这些系统，对于改进传统药物的评估和设计与目标生物系统

更有效相互作用的新疗法至关重要。

这一突破使科学家能以堪比物理实验的精度模拟药物行为。科学家现在不仅可观察药物的运动，还可观察其在生物系统中随时间变化的量子力学特性，例如键的断裂和形成。这对于评估药物可行性和设计新疗法至关重要。

目前，超过80%的致病蛋白没有已知药物可以治疗。先进的量子力学和高性能计算拓宽了药物发现的计算工具集，在生物相关规模上提供了前所未有的速度和准确性。重要的是，它们还提供了传统计算化学以前无法实现的见解和能力，从而开辟了调节治疗目标的新方法，并扩大了可有效治疗的目标疾病数量。

新研究将突破性的科学进步转化为功能强大且用户友好的平台，加速和增强了药物发现过程，为创新治疗打开大门。

作者：张梦然 来源：科技日报

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发