



## 理论室第15期学术报告



**报告题目：生物体系多尺度理论研究的方法发展及生命科学和生物医学应用**

**报告人：李国辉 研究员，中科院大连化学物理所**

**报告时间：2023年4月23日（星期日）上午 9:00**

**报告地点：南楼二层会议室**

**邀请人：高兴发 研究员**

### 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。并针对生命科学和生物医学领域重要体系的功能机理开展了一系列应用研究，取得了一批重要成果。

### 报告人简介：

李国辉，中科院大连化学物理所研究员，2016年获得国家杰出青年科学基金项目资助，当选英国皇家化学会会士，担任科技部863计划和国家重点研发计划项目首席科学家、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、中国生物化学与分子生物学会蛋白质专委会和酶学专委会委员，当选英国皇家化学会会士和国务院特殊津贴专家。09年回国以来先后在Nature和Science等国际核心期刊发表120余篇研究论文，研究成果入选2019年中国医学重大进展，多次在国际会议作为共同主席组织分会和做邀请报告。

1990.09–1997.06	辽宁师范大学	物理系	学士、硕士
1997.09–2000.06	中科院大连化学物理研究所		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
2004.1–2006.03	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		