

みずほ情報総研企画 MIZUHO/BioStationセミナー

～In silico 創薬へのFMO法の活用事例～

MIZUHO/BioStationは、フラグメント分子軌道(FMO)法に基づいてタンパク質などの大規模分子の電子状態計算や相互作用解析を可能にした量子化学計算プログラムパッケージであり、計算エンジンABINIT-MPと専用可視化プログラムBioStation viewerから構成されています。FMO法により計算された電子状態計算結果を可視化して直感的に用いることが可能であり、リガンド化合物とタンパク質との相互作用を官能基単位で定量的に評価することができるため、創薬における分子設計に有用な知見を得ることができます。

今回、CBI学会2015年大会の場をお借りして、MIZUHO/BioStationセミナーを開催いたします。

本セミナーでは、ユーザー様としてStructure based drug design (SBDD)の最前線で活躍されております帝人ファーマ株式会社の上村様、BioStationの開発グループにて応用研究で活躍されております日本大学の福澤先生をお迎えし、MIZUHO/BioStationを用いた解析事例をご紹介します。また、FMO法の特徴であるフラグメント間相互作用解析(IFIE)を各エネルギー成分(静電項、交換反発項、電荷移動項、分散項)に分解する新機能「PIEDA」を中心としたMIZUHO/BioStationの機能をご説明いたします。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

【スポンサーセッションの内容】

1. タイトル 「MIZUHO/BioStationセミナー:In silico創薬へのFMO法の活用事例」
2. 日時 2015年10月29日(木)13:30-15:00
3. 場所 東京・タワーホール船堀 4階 402 (東京都江戸川区船堀4-1-1)
4. 参加費 無料(別途、CBI学会2015年大会への参加申し込みが必要)
5. 参加申し込み 以下のURLより、参加お申込みをお願いいたします。
<http://www.mizuho-ir.co.jp/seminar/info/2015/biostation1029.html>

6. プログラム

- 13:30-14:00 基調講演「ヒスチジンのプロトン化による素子的相互作用を活用した創薬」
帝人ファーマ株式会社 生物医学総合研究所
上席研究員 上村 みどり 様
我々は新規なヒトキマーゼ阻害剤であるTJK002を取得し、ヒトキマーゼとの複合体共結晶構造を2.8Åの解像度で取得することに成功した。複合体共結晶構造解析により、TJK002は非共有結合型のユニークな阻害様式をとることが明らかとなった。FMOを用いた計算の結果からも、PIEDAを用いた成分解析よりHis57のイミダゾールリングが、Catalytic triadを構成するAsp102もしくはSer195によりプロトン化されることで、スタッキング構造が安定化されることが示唆された。S2'に結合することなしに、プロトン化したヒスチジンのイミダゾールリングに対するリガンドの相互作用による阻害様式はこれまでに報告例が無く、酵素阻害剤のドラッグデザインにおいて、新たなコンセプトを与えるものと考えられる。
- 14:05-14:30 「ABINIT-MP/BioStationによるFMO計算」
日本大学 松戸歯学部
助教 福澤 薫 様
*FMO法は生体高分子の量子化学計算解析に適した手法であり、ABINIT-MP/BioStationはFMO計算専用の可視化解析ツールとして様々な機能を有している。
ここではタンパク質-リガンド、タンパク-タンパク、DNAなどの様々な生体高分子系にFMO計算を適用した事例について解析法を交えながら解説する。*
- 14:35-15:00 「MIZUHO/BioStationの機能紹介」
みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部
コンサルタント 加藤 幸一郎
*MIZUHO/BioStationに実装されている相互作用エネルギー詳細解析機能であるPIEDAについて、理論的背景、算出される各種エネルギー成分などの意味を分かりやすく解説する。
また、MIZUHO/BioStationでの計算結果の可視化方法について、解析事例を踏まえて説明を行い、PIEDAをはじめとする機能のイメージを具体的に掴んでいただける機会としたい。*