

## 口頭発表「分子認識と分子計算」分野

Selected Oral Presentation from 1<sup>st</sup> Category (molecular recognition and molecular modeling)

## 開催趣旨:

本セッションは第一分野(分子認識と分子計算)の口頭発表で、ポスター発表の登録者の中から以下の5名の先生方に発表をお願いしています。本学会におけるこのような口頭発表セッションは、第一分野としては初めての試みとなります。たくさんの方のご来場をお待ちしております。

モデレーター: 石川 岳志 Takeshi Ishikawa 長崎大学 Nagasaki University  
山岸 賢司 Kenji Yamagishi 日本大学 Nihon University

**1. P1-01 An elucidation of STING phosphorylation mechanism by a combination of molecular dynamics simulations and molecular biological analyses**

Yuko Tsuchiya Institute for Protein Research, Osaka University

自然免疫反応において中心的な役割を果たすアダプター蛋白質 STING は、低分子リガンドとの結合により活性化され、その後リン酸化を受けることでシグナルを下流に伝達する。STING のリン酸化部位を含む約 40 残基の天然変性領域の立体構造決定は難しいため、構造レベルでのシグナル伝達機構の解明は困難である。我々は天然変性領域を含む STING モデルの分子動力学シミュレーションを行い、その結果と生化学実験による検証を基に STING 活性化機構を提唱した。

**2. P1-06 Approach to the quantitative prediction of the binding affinity in biomolecular system**

Yoshiaki Tanida Fujitsu Laboratories Ltd.

分子シミュレーションを用いて創薬を行おうとする場合、リガンド分子と受容体の結合活性(結合に関する標準自由エネルギー差)を定量的に予測しなければならない。そのためには、結合構造を予測する必要があるが、従来のドッキングシミュレーションでは十分な精度がない。今回、我々はメタダイナミクスによる構造探索とアルケミカル変換法による自由エネルギー計算を組み合わせることを提案し、その具体的な適用例を紹介する。

**3. P1-10 Estimating the qualitative and quantitative capability of the MM/3D-RISM method**

Masatake Sugita Department of Bioinformatics, College of Life Science, Ritsumeikan University

本研究では MD シミュレーションと 3D-RISM 理論を組み合わせた MM/3D-RISM 法を幾つかの系に応用し、分子間の親和性をどの程度正確に予測することが可能かを明らかにすることを試みた。そのために、HP  $\beta$  シクロデキストリンの包摂、Pim-1 キナーゼとその阻害剤の 2 つの系において MM/3D-RISM 法を応用した。その結果、どちらの系においても実験値と  $R=0.7$  程度の相関係数を得ることが出来た。

**4. P1-22 The molecular simulation for predicting RNA duplex dimerization free-energy changes upon mutations and three-dimensional protein-RNA complex structures**

Tomoshi Kameda

Artificial Intelligence Research Center, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

RNA に関するシミュレーション研究を 2 つ紹介する。第一に、RNA 二重らせん形成の熱安定性変化 ( $\Delta G$ ) を MD シミュレーションで予測したところ、実験値との相関が 0.97、誤差平均が 0.55 kcal/mol と極めて良好な結果を得た。第二に、RNA・蛋白質複合体の立体構造予測を、MD 力場の情報を援用したドッキング計算で行ったところ、世界最高精度で予測することに成功した。

**5. P1-24 Flexible Fitting to Cryo-EM Density Map using Ensemble Molecular Dynamics Simulations**

Osamu Miyashita RIKEN Advanced Institute for Computational Science

クライオ電子顕微鏡観測により様々な重要な生体分子複合体の構造情報が得られるようになってきている。しかし、その構造解像度は一般にはまだ高くなく、原子構造モデルの構築には他の実験からの情報を組み合わせる必要がある。今回、アンサンブルを考慮した分子動力学シミュレーションによる、構造モデリングの手法を開発した。この手法により、レプリカ交換法を用いることにより、これまでできなかった複雑なモデリングが可能になった。