

新モダリティ探索の新展開と計算による設計手法 (FMO 法) への期待
Recent advances of new modality and expectation for computer-aided design
including FMO method

開催趣旨:

近年、低分子以外のモダリティとして、抗体、核酸、中分子、TCR のネオ抗原、タンパク質分解などが提案され、それらの分子の探索・設計手法へのニーズが高まっている。本セッションでは、新モダリティの開発や設計を推進している先生を演者に迎えて、様々なモダリティの特徴と計算による設計手法の役割と期待をご紹介いただき、今後の FMO 法を含む設計手法開発の方針を議論したい。

モデレーター:

本間 光貴 (Teruki Honma)
理化学研究所 (RIKEN)
福澤 薫 (Kaori Fukuzawa)
大阪大学 (Osaka University)

1. イントロダクション (5分)

本間 光貴 (Teruki Honma)
理化学研究所 (RIKEN)

2. 感染症に対する T 細胞免疫を賦活するワクチン設計 (25分)

藤井 眞一郎 (Shin-ichiro Fujii)
理化学研究所 (RIKEN)

ウイルス感染に対して免疫系は、ウイルス侵入を防ぐ中和抗体と感染細胞を排除する T 細胞免疫に分かれる。特に T 細胞を効率よくコントロールするには、ウイルス抗原のエピトープ探索が必須である。本講演では、このような T 細胞性免疫を賦活するワクチン開発について紹介し、今後のワクチン設計への期待を論議したい。

3. 分子動力学シミュレーションの創薬応用と FMO 法への期待 (25分)

池口 満徳 (Mitsunori Ikeguchi)
横浜市立大学 (Yokohama City University)

分子動力学シミュレーションは、対象分子の動的な性質の解析に有効な方法として頻繁に用いられるようになってきているが、詳細に検討された力場が用意されている天然アミノ酸等以外では、力場に注意が必要である。本講演では、最近の分子動力学シミュレーションの創薬応用例を紹介するとともに、FMO 法への期待を述べたい。

4. 翻訳阻害剤の隠れた mRNA 配列特異性 (25分)

岩崎 信太郎 (Shintaro Iwasaki)
理化学研究所 (RIKEN)

多くのがん細胞では翻訳異常が生じていることが知られており、その異常翻訳を抑える翻訳阻害剤が抗がん剤の候補として大きな着目を集めている。これまで、翻訳阻害剤は特異性を持たず、一様に mRNA の翻訳を抑制すると考えられてきた。しかしながら、近年我々はこの前提を覆す mRNA 配列特異的翻訳阻害剤を発見し、その作用機序と選択性を解明してきた。本シンポジウムでは最新の進捗について紹介したい。

5. まとめ (10分)

福澤 薫 (Kaori Fukuzawa)
大阪大学 (Osaka University)