

CAMD セミナー

(Center for Development of Advanced Medicine for Dementia)

タンパク質構造情報とリガンド情報を最大限
活用したインシリコスクリーニングを目指して

理化学研究所 生命分子システム基盤研究領域
制御分子設計研究チーム

チームリーダー 本間 光貴 博士

平成 24 年 11 月 6 日(火) 午後 4 時 00 分～
第 2 研究所棟 2 階会議室

インシリコスクリーニングには、タンパク質構造に基づく方法(SBDD)と既知リガンド情報に基づく方法(LBDD)に大きく分けることができる。インシリコスクリーニングを実施する際、従来は、単一の方法だけで計算する場合が多かったが、どのような手法を使ったとしても、一つの「仮説」に過ぎず、単一で万能な方法は存在しないため、安定して成功を収めることは難しかった。近年、LBDD/SBDD という区分に拘らずに、既知の情報をすべて活用しつつ、複数の方法論を組み合わせることでインシリコスクリーニングを実施する考え方が普及してきた。

本研究室でも、そのようなコンセプトのもと、PALLAS/MUSES/LAILAPS などの各システムを構築し、多くの方法論、多くの計算条件を半自動的に検証し、検証の結果精度が高いと推測される方法を、目的に応じて組み合わせる体制を整備しつつある。

当日は、これらのシステムの概要や具体例を紹介するとともに、理研の創薬事業である、創薬・医療技術基盤プログラムと、今後の京コンピュータの利用にも触れたい。

連絡先: 認知症先進医療開発センター
センター長 柳澤勝彦(内線 6500)