

スポンサードシンポジウムSS03

最新理論化学計算の現状と創薬化学との接点

Current Trends of Theoretical and Medicinal Chemistry

宮地 弘幸¹, 常盤 広明²

¹岡山大院医歯薬, ²立教大理

情報科学的手法と量子化学理論の急速な発展を背景に、創薬ターゲットとなるタンパク質の高精度全電子計算が可能となってきた。従来までの経験的な手法とは一線を画する手法として、諸熊らの ONIOM 法や北浦のフラグメント分子軌道 (FMO) 法が挙げられる。これらの理論的手法は、*in silico* 創薬の枠に留まらず、現在の創薬手法を根幹から一変してしまう可能性を秘めている。特に今後、これらの手法を基盤とした実際の系に対する解析が進み、薬剤候補化合物とターゲットタンパク質のヴァーチャルスクリーニングや酵素反応解析において、実用化が実現すればハイスループット創薬に向けた大きなブレイクスルーがもたらされるものと期待される。

本シンポジウムでは、これらの手法の開発者自らのお話しはもちろんのこと、具体的な実用例について紹介する。また、実験的創薬化学および有機合成化学サイドから、最新の話題についても同時に提供する。さらに、これらの解析システムを実際の実験系研究室に導入するための手引きなどについても触れる。具体的な実用例としては、実際の酵素反応・金属触媒反応、構造化学を基盤としたシグナル伝達と転写制御、分子認識、薬物ターゲット受容体、およびプロテアーゼなどに関する分子論的解析についてお話いただく。