

## 株式会社菱化システム ランチョンセミナー 分子間相互作用の解析と応用

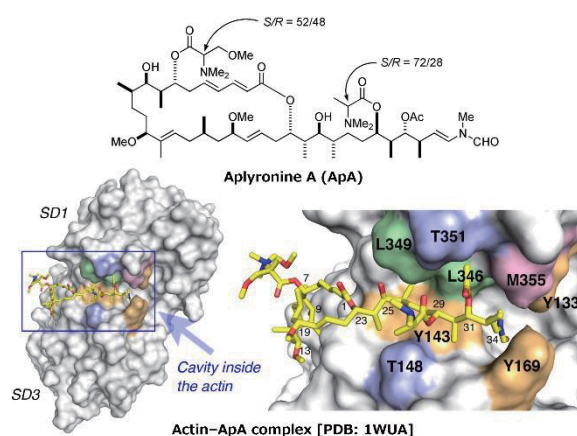
日時： 11月25日（金） 11:45 ~ 12:35

場所： B会場（中会議室202）

### タンパク質間相互作用を誘導する有機小分子

筑波大学 数理物質系 化学域 准教授 北 将樹

近年、タンパク質間相互作用を制御する有機小分子が、天然物および合成化合物ライブラリから多数見いだされており、新たな作用機序を有する医薬品などへの応用が期待されています。海洋天然物アプリロニン A は、2つの細胞骨格タンパク質、アクチンとチューブリン間の相互作用を誘導し、微小管ダイナミクスを阻害するユニークな抗腫瘍性物質です。本ランチョンセミナーでは、ケミカルプローブ法および統合計算化学システム MOE によるシミュレーションを組み合わせたアプリロニン A の結合様式解析、および新規活性リガンドの創出を目指した分子設計と構造活性相関研究などについて、これまでの取り組みを発表します。



### タンパク質間相互作用の解析

株式会社菱化システム 科学技術システム事業部 木村 嘉朗

タンパク質間相互作用（PPI）は、免疫系、シグナル伝達、酵素阻害などにおいて、重要な役割を果たしており、生命科学分野における主要な研究対象の一つです。統合計算化学システム MOE には、タンパク質同士のドッキングシミュレーション、タンパク質表面の特徴づけ、タンパク質間の水素結合の検出など、PPI 解析に有用なさまざまな機能を搭載しています。本セミナーでは、これらの機能の応用例を紹介します。