理学談話会（化学コース）

【タイトル】 統合的計算化学手法による生体機能解析と創薬支援技術

【講演者】 重田育照　先生

筑波大学 計算科学研究センター 教授

【日時・場所】 12月15日（火）15:00～

自然科学本館109講義室

概要

本講演では、量子化学計算と分子ダイナミクスを融合させた生命分子解析と、それに基づく創薬デザインの最新展開について概説する。

標的タンパク質とリガンドの結合解析において、経験的評価や事前情報に依存しないab initioドッキングの重要性が高まっている。我々は効率的サンプリング手法であるLBPaCS-MD（Ligand Biding Parallel Cascade Selection MD）を活用し、バイアスを加えることなく、解離状態からの結合経路探索および安定な結合モード予測（ab initio docking）を高速・高精度に達成するアプローチを展開してきた。さらに、探索された結合構造に対してフラグメント分子軌道（FMO）法などの量子化学（QM）計算を組み合わせることで、量子性を考慮した電子状態レベルでの詳細な分子間相互作用解析を実現している。当日は、SARS-CoV-2関連標的等に対する適用事例を中心に、本手法の有用性と実験科学との連携による次世代計算創薬の展望を議論する。

連絡先　水野元博（mizuno@se.Kanazawa-u.ac.jp）