

研究タイトル:分子動力学シミュレーションを用いた薬剤の標的選択性の解明



氏名:	和久井 直樹 / WAKUI Naoki	E-mail:	wakui@nagaoka-ct.ac.jp
職名:	助教	学位:	博士 (理学)
所属学会・協会:	特になし		

キーワード: IT 創薬、分子動力学シミュレーション

- 技術相談
提供可能技術:
- ・分子動力学シミュレーション
 - ・薬剤と標的タンパク質の相互作用解析
 - ・薬剤と標的タンパク質の複合体構造モデリング

研究内容:

研究分野

製薬会社が1つの薬を患者さんの元に届けるのに必要な研究開発費は約3,000億円、研究開発期間は9年~17年と言われており、研究開発費の削減や開発期間を短縮するために計算機を用いた創薬研究が注目を集めています。分子動力学シミュレーションを用いることでタンパク質と化合物の「動き」を計算機の中で再現し、タンパク質と化合物の相互作用(図1. a)などを解析することができます。また、機械学習を用いることで化合物の特徴を学習し、未だ実験が行われていない化合物の活性を予測することができます。これら2つの手法を中心に計算機の中で効率的な化合物設計を目指しています。

現在は、急性骨髄性白血病や多発性骨髄腫などのがん細胞の成長を維持するのに必要なことが明らかになっているMCL1(図1. b)と呼ばれるタンパク質や関節リウマチの原因タンパク質として考えられているPAD4(図1. c)と呼ばれるタンパク質を研究対象としています。

技術 PR/企業に向けて

分子動力学シミュレーションの他、タンパク質と阻害剤の複合体構造モデリング、ドッキングシミュレーションの経験があるためIT創薬分野に関する幅広いご相談を承ります。また、スーパーコンピュータ(東京工業大学学術国際情報センターのTSUBAME3.0)を日々の研究でも利用しているため、TSUBAME3.0の学術利用や産業利用に関してもお力になれることがあるかもしれません。

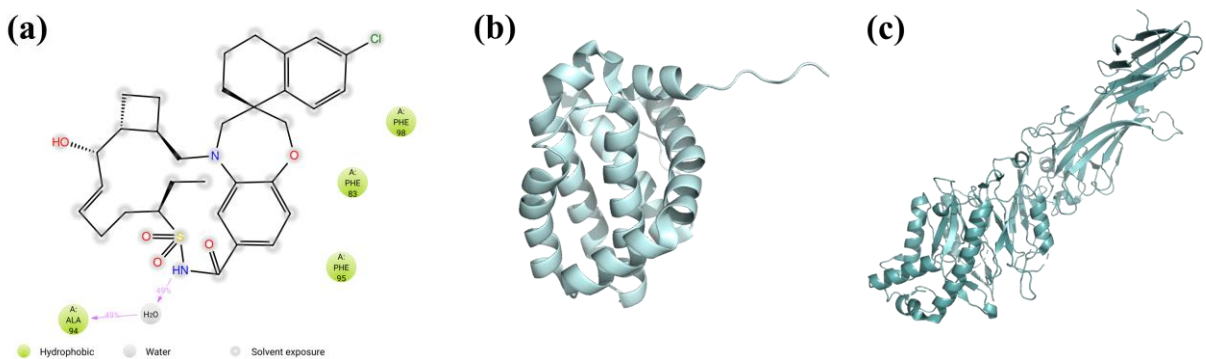


図 1.相互作用解析結果の例と標的とするタンパク質の立体構造

提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	
特になし	

Exploring the selectivity of protein-inhibitor complex.



Name	Naoki Wakui	E-mail	wakui@nagaoka-ct.ac.jp
-------------	-------------	---------------	------------------------

Status	Assistant Professor		
---------------	---------------------	--	--

Affiliations			
---------------------	--	--	--

Keywords	Computer Aided Drug Design, Molecular dynamics simulation		
-----------------	---	--	--

Technical Support Skills	<ul style="list-style-type: none"> • Structure modeling of protein-inhibitor complex structure. • Molecular dynamics simulation. • Interaction analysis between protein and inhibitor. 		
---------------------------------	---	--	--

Research Contents

Research area

Drug development is an expensive, time-consuming process; the cost is estimated to be approximately \$2.6 billion dollars, and 12–14 years are required for a drug to reach the market. To decrease these costs, computational techniques have been applied in various drug development studies, and many studies have successfully discovered new therapeutic compounds by employing computational techniques. By using molecular dynamics simulation, the “movement” of protein and compound can be simulated in the computer, and the interactions between protein and compound can be analyzed.

MCL1, is needed to sustain the growth of cancer cells such as acute myeloid leukemia and multiple myeloma, and PAD4, is thought to be highly related to Rheumatoid arthritis. Those proteins are current main research target.

Technology

In addition to molecular dynamics simulation, structure modeling of protein-inhibitor complex structure and docking simulation can be supported. Since We utilize TSUBAME3.0, a large-scale supercomputer managed by Tokyo Institute of Technology Global Scientific Information and Computing Center, in daily research, applying for academic and industrial use could be supported. Please feel free to inquiry for anything related to computer aided drug discovery.

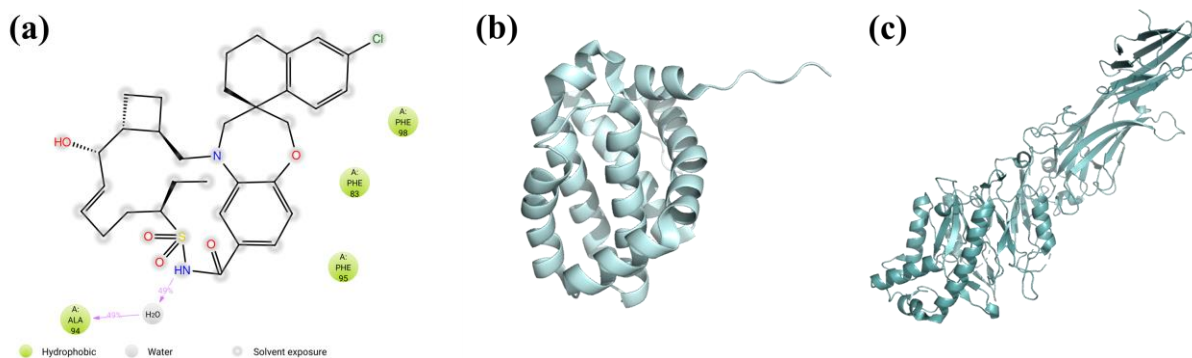


Figure 1. example of interaction analysis and Three-dimensional structure of target proteins.

Available Facilities and Equipment
