

神経研究所 所内セミナー

日時：平成 30 年 4 月 18 日（水）16：00～17：00

場所：研究所 3 号館 1 階 セミナールーム

演者：田沼 靖一 先生

東京理科大学総合研究院 教授

演題：タンパク質間相互作用を標的とした *in silico* 創薬手法の
開発と実践 — アポトーシス／炎症制御性化合物の創製 —

講演内容

タンパク質—タンパク質相互作用 (Protein-Protein Interaction ; PPI) は生命反応の主幹にあり、その変調、破綻が多くの重篤な疾患の発症原因となっています。この PPI は創薬ターゲットの宝庫ではありますが、そこを人為的に制御できる低分子化合物（医薬分子）を創製するのは非常に難しいという意見が根強くあります。それは、PPI に対して、現在の創薬手法の主流である HTS (High Throughput Screening) / CC (Combinatorial Chemistry) の組み合わせでは、十分な薬効を有する化合物を探すことは難しく、しかもその最適化も試行錯誤になってしまうからです。このような問題をブレークスルーするには、コンピュータシミュレーション技術を駆使した新しい *in silico* 創薬手法を開発することが有効であると考えられます。

演者らはタンパク質間相互作用を標的として、“最適医薬分子を創る”という課題に対して、新たな創薬方法論 (COSMOS; Conversion to Small Molecule through Optimized-peptide Strategy) を考案し、それを実装する新しい *in silico* 分子設計手法を開発しました。そのコンセプトは、「創薬ターゲットタンパク質の Hot Spot に対して、最適結合ペプチドを設計し、その結合配座を基に低分子変換設計から最適医薬分子を創製する」というものであります。本セミナーでは、その戦略の理論と実践について紹介します。

担当・連絡先 : 遺伝子疾患治療研究部 5221