

千里ライフサイエンス新適塾
「未来創薬への誘い」第 67 回会合

量子化学計算で観る生命科学と 創薬への展開

講 師：福澤 薫（ふくざわ かおり） 先生

大阪大学大学院薬学研究科

量子生命情報薬学分野（化学薬学領域） 教授

日 時：2024 年 10 月 23 日（水）講演会 18:00～19:15 【Hybrid】
懇親会 19:15～20:15

場 所：千里ライフサイエンスセンタービル 6 階 千里ルーム A
（懇親会は同ビル 5 階 Port 5）

定 員：会場参加 80 名、WEB 参加 200 名

参加費：講演会、懇親会とも無料

参加は事前申込みされた方（申込締切り 10 月 18 日）のみとし、定員になり次第締切ります。当財団のホームページの「参加申込」からお申込み下さい。

https://www.senri-life.or.jp/event_upcoming/shintekijuku-miraisouyaku/

オンデマンド配信は予定しておりません。

コーディネーター

小比賀 聡（大阪大学大学院薬学研究科 教授）

水口 裕之（大阪大学大学院薬学研究科 教授）

主催：公益財団法人 千里ライフサイエンス振興財団

〒560-0082 大阪府豊中市新千里東町 1 丁目 4 番 2 号

千里ライフサイエンスセンタービル 20 階

E-mail：smp-2022@senri-life.or.jp Tel：06-6873-2006

<https://www.senri-life.or.jp>

量子化学計算で観る生命科学と創薬への展開

福澤 薫 (ふくざわ かおり)

大阪大学大学院薬学研究科 量子生命情報薬学分野 教授

講演要旨

生命科学現象は、生体分子の挙動と分子間の相互作用から成り立っている。量子化学計算では、分子の電子状態に基づいてこれらを理解することができる。我々は、フラグメント分子軌道 (FMO) 法という日本発の量子化学計算を用いて、タンパク質や核酸、脂質などの生体高分子の挙動を原子分子レベルで明らかにし、生命科学現象の解明や創薬分子設計につながる研究を行っている^{1,2}。また FMO 法の創薬現場での実用化を目指した産学官連携の「FMO 創薬コンソーシアム」を運営し、創薬方法論の開発と共に、計算結果を集約した「FMO データベース³」の構築と公開を行っている。

FMO 計算では、分子間の相互作用エネルギーを定量的に評価することができ、タンパク質-リガンド間相互作用、タンパク質-タンパク質間相互作用、核酸の相互作用などへの応用が進んでいる。低分子系では、化合物の結合性予測や新規化合物の提案を目指し、また抗体・中分子・核酸系などの新モダリティでは抗原抗体やウイルスタンパク質の分子認識メカニズムの評価に加えて、阻害剤の低分子化や RNA を標的とした創薬を目指している。スーパーコンピュータが「富岳」の時代になり、大規模データを扱えるようになったため、最近では、古典分子動力学 (MD) 法、ドッキング、機械学習・AI 法などの各種手法と FMO 法と組み合わせて、多様な構造や水中での熱揺らぎを考慮した構造を作成し、分子の動的挙動を踏まえた定量的相互作用解析を行っている。実験研究者との連携研究によって、実験結果の理論的解釈のみならず、理論予測が可能になりつつある。講演では、FMO 法の生命科学・創薬分野での利活用について、近年多様化する創薬モダリティやデータサイエンスを交えて、最近の進展を紹介する。

参考文献

1. Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method” ed. by Y. Mochizuki, S. Tanaka and K. Fukuzawa, Springer Nature (2021).
2. K. Fukuzawa and S. Tanaka, “Fragment Molecular Orbital Calculations for Biomolecules” Curr. Opin. Struct. Biol, 72, 127-134 (2022).
3. D. Takaya, C. Watanabe, S. Nagase et. al., “FMO DB: The world's first database of quantum mechanical calculation for biomacromolecules based on the fragment molecular orbital method” J. Chem. Info. Model., 61, 777-794 (2021).

講師略歴：

学歴・職歴

- 2022年4月 - 現在 : 大阪大学大学院薬学研究科 教授
2020年4月 - 現在 : 東北大学大学院工学研究科 特任教授 (クロスアポイントメント)
2016年10月 - 2022年3月 : 星薬科大学薬学部 准教授
2014年7月 - 2016年9月 : 日本大学松戸歯学部 助教
2000年4月 - 2014年6月 : みずほ情報総研株式会社

学位：博士（工学）

受賞・その他

- 2024年 第11回 「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題 優秀成果賞
2019年 星薬科大学 大谷賞
2018年 第5回 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 優秀成果賞
2017年 第4回 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 優秀成果賞
2015年 第8回 資生堂女性研究者サイエンスグラント

所属学会

日本薬学会、日本化学会、日本薬剤学会、CBI学会、日本蛋白質科学会、日本コンピュータ化学会

委員等

HPCI 計画推進委員、HPCI コンソーシアム理事、CBI学会評議員、CBI学会 FMO 研究会主査、FMO 創薬コンソーシアム代表、日本薬学会構造活性相関部会、幹事、日本薬剤学会デジタル製剤学 F G 幹事、大阪大学評議員