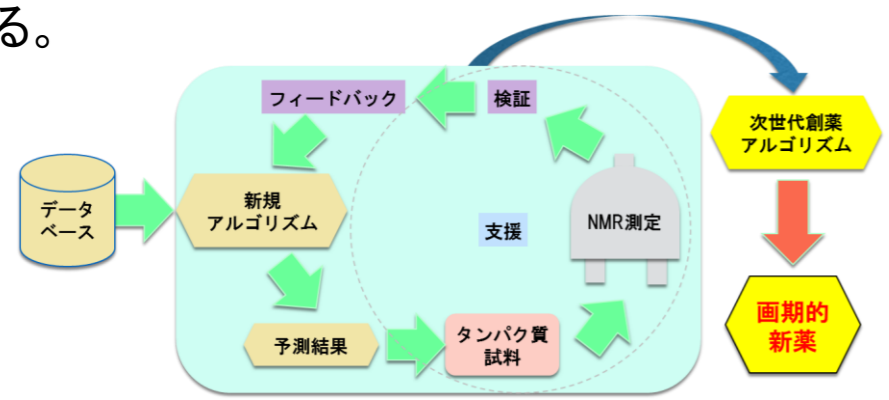


# インシリコ創薬技術の新規アルゴリズム開発支援

## [技術の概要]

### インシリコ創薬技術の新規アルゴリズム開発支援

革新的新薬の創成には、新規の創薬標的の発見やシーズの発見、相互作用予測や分子設計など、新たなアルゴリズムが必要である。特に創薬標的中に含まれる天然変性タンパク質の予測や、標的ポケット部位の類似性の予測など、予測法の精度向上には、開発過程における実証実験によるフィードバックが必須である。そこで、拠点が保有するノウハウである「NMR試料の発現系迅速構築法(PRESAT-vector法)」、「天然変性タンパク質に特化した発現系」、「インバース標識技術」、「アミノ酸選択的標識技術」、「非線形サンプリングによる高速NMR測定」、「NMRデータのPCA解析」などの手法を組み合わせ、創薬に資する新規の数理アルゴリズム開発を支援する。



### 支援に供する設備名

- 高磁場核磁気共鳴装置 (名古屋大学構造生物学研究センター)
- ・Bruker 社製 (900MHz、600MHz x 2台、500MHz x 2台)
- ・極低温プローブ装備



## [技術利用例]

情報拠点・東北大学木下教授らの開発したeF-Site/eF-Seek(タンパク質表面の類似性比較検索アルゴリズム)が新規のシード化合物探索ならびにファーマコフォア探索に有用なことを網羅的試料調製・NMR相互作用実験を組合せて実証。更に同法を応用してPDZドメインに結合する共通のファーマコフォアの発見につなげた。

解析拠点(インフォマティクス領域)名古屋大学太田教授・前橋工科大学福地准教授らの開発した天然変性タンパク質データベースIDEALおよび予測アルゴリズムDICHOTの実用性を検証した。並行して天然変性タンパク質がバイオ医薬品の新規の添加剤(安定化剤)として創薬に応用可能なことを実証して特許を出願した。

### 連絡先

[所属] 名古屋大学大学院理学研究科附属  
構造生物学研究センター

[名前] 廣明秀一

[E-mail] hiroaki.hidekazu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp