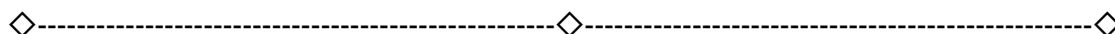


## NBCI ライフ分科会講演会のご案内

ナノテクノロジービジネス推進協議会（NBCI）ライフ分科会では、ライフサイエンス分野の講演会を開催しています。今回は、最新のシミュレーション技術とコンピューター創薬に関して日本大学 福澤薫先生に依頼し、下記内容にて講演を頂けることになりました。



日時：8月31日（月）16時～17時30分（終了後、交流会）

講師：日本大学 松戸歯学部 教養学（化学）講座 助教  
福澤 薫 様

演題：コンピューターシミュレーションによる高精度分子設計  
～副作用の少ない薬剤や親和性の高いインプラントの設計に向けて～

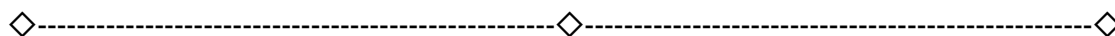
会場：東京 YWCA 会館 3F NBCI 会議室  
（千代田区神田駿河台 1 丁目 8 番地 11 東京 YWCA 会館）

参加対象：NBCI 正会員対象（幹部・一般会員限定）

申込期限：8月26日（水）

申込先：NBCI ライフ分科会 担当 宮田 [miyata\(at\)nbcj.jp](mailto:miyata(at)nbcj.jp) まで。

交流会への参加可否もあわせてお知らせください。



### 【講演概要】

タンパク質を標的とした近年の医薬品開発では、コンピューター解析を用いた論理的な分子設計が重要な基盤技術となっている。特に創薬の初期段階であるリード化合物の設計では、標的タンパク質と医薬品候補化合物との相互作用を精密に評価することで有用な情報が得られる。近年では量子化学手法による精密計算が注目を浴びており、中でもフラグメント分子軌道(FMO)法は、タンパク質をアミノ酸残基などのフラグメントに分割して扱い、フラグメント間の相互作用エネルギーに基づいて化合物との相互作用を高精度に解析することができるため、従来法と比較して飛躍的に精度の高い信頼性と有効性を持った論理的創薬に繋がるのが期待されている。これらの期待を現実のものとする

ために、昨年11月に「FMO創薬コンソーシアム」（代表者：福澤）を立ち上げ、現時点で製薬企業12社、IT企業1社、アカデミア7機関からの参加を得て、電子の挙動まで考慮にいれた高精度インシリコ創薬手法としての「FMO創薬」技術の開発を行っている。スパコンの活用も積極的に行っており、H27年度の「京」産業利用課題「HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築」を推進している。精密な量子化学計算に基づく本手法の開発によって、ヒット化合物の活性やその他の医薬品に必要なプロファイルを向上させる際に、これまでとは比較にならない精度の高い予測から新規化合物を提案できる可能性を秘めており、多くのターゲットに対する創薬を大きく効率化できると考えられる。

またFMO法は汎用的な量子化学計算手法であるため、さまざまな分野の分子設計に応用可能である。最近ではナノバイオテクノロジー分野の境界/界面問題へのFMO法の適用を始めている。固体と生体分子との相互作用の精密解析は、インプラントの表面改質による生体親和性の向上、ナノ粒子による薬剤投与（ドラッグデリバリー）、生体結晶析出（バイオミネラルゼーション）などの設計製造に係る医療工学や生物工学、さらには極微量でのタンパク質やDNAの検出を意図した高感度バイオセンサーといったデバイス類を開発する応用物理学の分野まで、適用範囲が広い。これまでにFMO法によって、シリカ基盤や骨・歯の主要成分であるハイドロキシアパタイト表面へのペプチド分子の吸着シミュレーションに成功しており、将来的には骨形成メカニズムの解明や安全性の高い歯科・外科用インプラントの設計、バイオセンサーでの検出過程のシミュレーションなどのナノバイオテクノロジー分野の研究・設計に幅広く役立つと期待される。

本講演会では、インシリコ創薬におけるFMO法と周辺基盤技術の進歩について、またナノバイオ分野における展開について、最新の研究成果をご紹介します。

#### 【参考】

<http://www.mizuho-ir.co.jp/company/release/2015/fmo0507.html>

<http://www.mascat.nihon-u.ac.jp/wp/?p=2808>

[https://sangakukan.jp/journal/journal\\_contents/2014/05/articles/1405-03-2/1405-03-2\\_article.html](https://sangakukan.jp/journal/journal_contents/2014/05/articles/1405-03-2/1405-03-2_article.html)

一般社団法人ナノテクノロジービジネス推進協議会  
ライフ分科会  
<http://www.nbci.jp>