

---

特命准教授	梅寄 雅人	Associate Professor	Masahito Umezaki (Ph.D.)
技術補佐員	池原 達郎 (3月まで)	Assistant	Tatsuro Ikehara

---

### ◇研究目的

トランスレーショナルリサーチ推進部門情報科学分野では、バイオ・ケモインフォマティクスを利用して和漢医薬・民族薬物について研究を進めている。特に、コンピュータシミュレーションである量子化学計算や分子動力学計算を利用して、和漢薬有効成分の解析に応用し、その分子構造と生理活性との量子化学的な相関性を明らかにしようとするものである。ほかに、ゲノム研究などのバイオインフォマティクスの成果である様々な生体物質に関する情報を利用し、和漢薬有効成分の作用機序を明らかにする研究を実施している。さらに、これらの研究成果をデータベース化し情報発信も実施していく。

### ◇研究概要

#### I) バイオ・ケモインフォマティクスを利用した和漢薬成分の解析

- 1) 和漢薬成分の量子化学計算手法を用いた解析
- 2) 和漢薬成分の立体構造データベースの構築

#### II) 和漢医薬学におけるゲノム解析の応用

- 1) 和漢薬成分とヒトタンパク質の結合解析シミュレーション
- 2) コンピュータシミュレーションによる、和漢薬成分の作用機序解析

### ◇原著論文

- 1) Minehira D., Takeda D., Miyawaki S., Kato A., Adachi I., Miyazaki A., Miyatake R., Umezaki M., Miura K., Kitahara Y., Sugimoto K., Matsuya Y., Toyooka N.: Synthesis and Evaluations of GLP-1 Secretion and Anti-Diabetic Effect in KKAY Mice of New Tricyclic Compounds. *Heterocycles*, 90: 372-404, 2015.
- 2) Shigyo M., Kuboyama T., Sawai Y., Tada-Umezaki M., Tohda C.: Extracellular vimentin interacts with insulin-like growth factor 1 receptor to promote axonal growth. *Scientific Reports*, 5: 12055, 2015.
- 3) 鈴木哲, 梅寄雅人, 沢井祐佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ PDB 構造データに準拠した光合成系における励起遷移過程の計算手法の提案. *光合成研究*, 2015 Dec; 25(3): 182-186.

### ◇学会報告

- 1) 梅寄雅人, 沢井裕佑, 佐久間勉: PPAR の活性調節に対するリン酸化の影響. 日本薬学会第 135 年会, 2015 Mar 25-28, 神戸.

- 2) 鈴木哲, 梅寄雅人, 沢井祐佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ 紅色光合成細菌における B800-850 周辺アンテナ系の光励起遷移の考察. 日本化学会第 95 春季年会, 2015 Mar 26-29, 千葉
- 3) 鈴木哲, 梅寄雅人, 沢井祐佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ シアノバクテリアの光化学 II コアアンテナ系における光励起遷移の考察. 第 23 回「光合成セミナー2015: 反応中心と色素系の多様性」, 2015 Jul 11-12, 京都.
- 4) 梅寄雅人, 鈴木哲, 沢井祐佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成アンテナ系 LH2 の B850 における励起遷移に関する解析. 第 23 回「光合成セミナー2015: 反応中心と色素系の多様性」, 2015 Jul 11-12, 京都.
- 5) 梅寄雅人, 山西芳裕: 和漢薬・生薬由来化合物のターゲットタンパク質探索データベースの構築. 第 32 回和漢医薬学会大会, 2015 Aug 21-23, 富山.
- 6) Shigyo M, Kuboyama T, Sawai Y, Tada-Umezaki M, Tohda C: Extracellular vimentin interacts with insulin-like growth factor 1 receptor to promote axonal growth. 第 58 回日本神経化学学会大会, 2015 Sep 11-13, 埼玉.
- 7) 田林功至, 春木孝之, 佐藤雅弘, 紺野勝弘, 梅寄雅人, 数馬恒平: 溶媒中試薬 LC-MS データの成分差分解析, 平成 27 年度電気関係学会北陸支部連合大会, 2015 Sep 12-13, 金沢.

#### ◇共同研究

##### 国内

- 1) 立川仁典: 横浜市立大学 大学院国際総合科学研究科, 「和漢薬有効成分の量子化学的計算による解析」, 2011, 4~
- 2) 春木孝之: 富山大学工学部, 「和漢薬有効成分と標的タンパク質の分子動力的解析」, 2011, 9~
- 3) 小野慎: 金沢工業大学, 「コンピュータケミストリーによる分子設計支援」, 2011, 10~
- 4) 鈴木哲: 信州大学名誉教授, 「光合成系のエネルギー遷移に関する解析」, 2012, 1~
- 5) 阿部隆: 新潟大学 大学院自然科学研究科, 「ヒトタンパク質の立体構造予測に関する研究」, 2012, 11~
- 6) 山西芳裕: 九州大学高等研究院, 「和漢薬及び生薬含有由来化合物のターゲット候補タンパク質探索」, 2014, 4~
- 7) 五斗進: 京都大学化学研究所, 「和漢薬及び生薬含有化合物のクラスタリング解析」, 2015, 1~

#### ◇非常勤講師

- 1) 梅寄雅人: 放送大学面接授業「初歩からのパソコン」2015, 富山.