

◇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) Ono S., Nakai T., Kuroda H., Miyatake R., Horino Y., Abe H., Umezaki M., Oyama H.: Site-selective chemical modification of chymotrypsin using peptidyl derivatives bearing optically active diphenyl 1-amino-2-phenylethylphosphonate: Stereochemical effect of the diphenyl phosphonate moiety. *Biopolymers*, 106: 521-530, 2016. doi: 10.1002/bip.22790.

◇学会報告

- 1) 鈴木哲, 梅寄雅人, 錦織広昌: 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系IIにおけるCLHおよびCP43中心アンテナ系の励起遷移の半経験的電子状態計算. 第24回光合成セミナー2016: 反応中心と色素系の多様性; 2016 Jul 9-10; 京都.
- 2) 鈴木哲, 錦織広昌, 梅寄雅人: 誰にでも明日から始められる光合成初期過程の量子論的解明 半経験的分子軌道法による超分子系の励起電子状態計算. 第24回光合成セミナー2016: 反応中心と色素系の多様性; 2016 Jul 9-10; 京都.
- 3) 小野慎, 中居孝彦, 沢井裕佑, 堀野良和, 畔田博文, 尾山廣, 阿部仁, 梅寄雅人: キモトリプシン Lys175への部位選択的修飾法: 部位選択性に重要なジペプチド部分の設計. 第53回ペプチド討論会; 2016 Oct 26-28; 京都.

◇共同研究

学内

- 1) 門脇 真 (富山大学和漢医薬学総合研究所消化管生理学教授), 山西芳裕 (九州大学高等研究院准教授), 柴原直利 (富山大学和漢医薬学総合研究所漢方診断学教授), 東田千尋 (富山大学和漢医薬学総合研究所神経機能学准教授), 「漢方薬成分のインシリコ標的タンパク質探索による漢方薬リポジショニング」, 2016, 4, 1～

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～