

# 低分子化合物などのリガンド結合部位比較/予測

## [技術の概要]



- 低分子化合物などのリガンドと相互作用する部位と類似する局所構造を高速に列挙。リガンド側、レセプター側の双方から検索が可能。(PoSSuM)
- 承認済みの経口低分子化合物の結合部位と類似した部位、また類似部位に結合する分子を探索した結果を公開。(PoSSuMds)

創薬に重要な低分子化合物の解析支援を行う。PDBサイズのデータベースに対しても感度を損なうことなく、高速に検索を行うことが可能となっている。サーバーでは網羅的比較計算済みの結果を検索可能。

(PoSSuMサーバー)

<http://possum.cbrc.jp/PoSSuM/>

## [技術の利用例]

- 既知のリガンドの相互作用部位との類似性に基づく新規結合部位の検索。
- 研究対象のタンパク質の構造/構造モデルに対して、どのようなリガンドが結合する可能性があるか予測。
- 承認済みの経口低分子化合物と類似の化合物、またレセプター側の多様性をPDBスケールで解析した結果を公開(例: 化合物の結合様式の比較やファーマコフォアの推定などに利用可能)。

## 連絡先

[所属] 国立研究開発法人  
産業技術総合研究所

[名前] 富井健太郎

[E-mail] k-tomii@aist.go.jp