

FMO-PBSAによる親和性評価

[技術の概要]

フラグメント分子軌道法(FMO法)による量子化学計算と溶媒効果を連続体モデルで表現するPBSA項を組み合わせた結合親和性予測方法です。

特徴

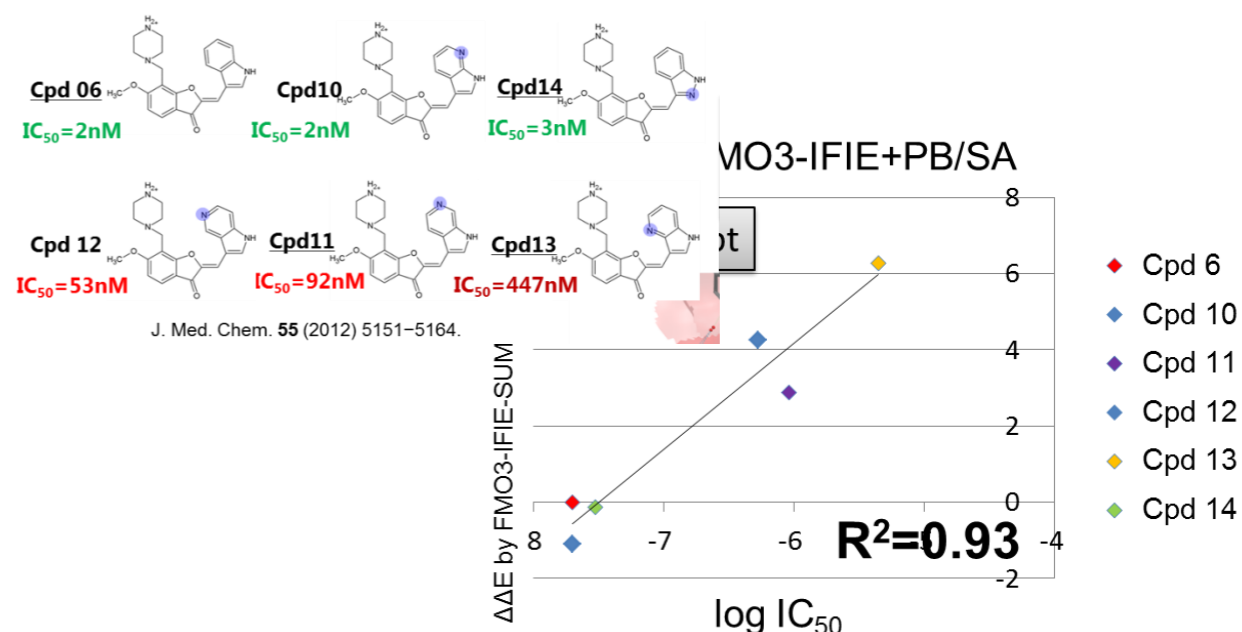
- 分子力学法(MM)では表現できない π 相互作用等の分散力・電荷移動などを正確に予測できません。
- 従来のドッキングスコアや、分子動力学計算は、MMに基づいたスコアを用いており、それらで予測できない場合に有効です。

今後の展開

- 現在、製薬企業12社、IT企業1社、アカデミア7機関が集まって、FMO創薬コンソーシアムを結成し、この手法を含むFMO法の創薬利用の方法論の開発を行っています。理研の計算機その他、HPCIの課題としても採択されていますので、京を利用することもできます。
(その場合、結果の公開が必要)

[技術の利用例]

Pim1阻害剤の小さな構造変化による活性の違いを精密に予測することに成功



連絡先

[所属] 理化学研究所
制御分子設計研究チーム

[名前] 本間光貴

[E-mail] honma.teruki@riken.jp