

第 回創薬インフォマティクス研究会

トピックス:「蛋白質の立体構造情報」

2005年1月26日 13:00 - 18:00

東京大学医科学研究所 第一講堂にて

事前登録不要

主催 日本バイオインフォマティクス学会(JSBi) (<http://www.jsbi.org/society.html>)

問い合わせ先 JSBi事務局 (jimu@jsbi.org) 担当: 鈴木

参加費: JSBi非会員は2000円(学生1000円)

JSBi個人会員は無料(賛助会員は1口につき1名無料)

進行表

- | | | |
|-------------|--|--------------------|
| 13:00-13:15 | 第3回研究会開催のご挨拶 | 中井謙太(東京大・JSBi 評議員) |
| | (第一部) | 座長 白井宏樹(山之内製薬) |
| 13:15-14:15 | タンパク質立体構造予測における既知構造情報の有効利用
= CASP 最新情報、Fold 認識手法開発の紹介 =
富井健太郎(産総研・生命情報科学研究センター) | |
| 14:15-15:15 | NMR を利用した新規の機能性蛋白質ドメインを発見するための方法論
= Bioinformatics手法を利用した構造・機能解析 =
廣明秀一(横浜市立大学大学院・総合理学研究科) | |
| 15:15-15:45 | (休憩) | |
| | (第二部) | 座長 松末朋和(持田製薬) |
| 15:45-16:45 | ドラッグデザインと蛋白質立体構造
= 創薬現場での応用事例と問題点、今後への展望 =
小田 晃司(大正製薬株式会社・研究システム部) | |
| 16:45-17:45 | 蛋白質立体構造予測技術
= CASP 最新情報、ゲノムワイドな利用、インシリコ創薬 =
竹田 - 志鷹真由子(北里大学・薬学部) | |
| 17:45-18:00 | 総括: 第四回創薬インフォマティクス研究会の御知らせ
江口至洋(三井情報開発株式会社) | |

第 回創薬インフォマティクス研究会開催にあたり

研究会主査・白井宏樹

副査・江口至洋

2004年に開催された2回の研究会ではともに100名を超える参加者による活発な討論が行われました。本研究会は、「インシリコ駆動型創薬」を実現する推進力となる研究会でありたいと考えておりますが、そのためには、創薬に用いる種々の「情報」について、その情報もつ有用性と限界について正確に把握しておくことが肝要と考えております。今回は、創薬の幅広い段階で利用価値のある「蛋白質の立体構造情報」をトピックスとして、現状と展望を議論致します。

最上流の過程である新規創薬ターゲットの発見の過程においては、蛋白質の立体構造情報を活用することで、ゲノム配列の並びだけでは推測しきれない情報を抽出することが期待されています。また、中流の過程であるリード化合物を創製したり最適化する過程においては、ドラッグデザインする際に有効な情報を提供することが期待されています。さらに、“Structural Pharmacogenomics”と呼ばれる最近の概念には、下流の過程である医薬品の開発や市販された医薬品を再調査する過程で、臨床効果や副作用の個人差の合理的解釈を可能にする分野であると期待されています。蛋白質の構造情報がこのように製薬会社の上流から下流にまたがって有効活用される背景には、立体構造情報が、化学と生物学のインターフェイスであることや、蛋白質の構造空間が配列空間よりも収束しているということなど、本質的な理由がありますが、一方で実験的手法による構造決定の急増や、各種構造予測、構造シミュレーション手法の進展などにより本分野の進展が著しいことも挙げられましょう。注意すべきは、有用性が高い一方で、蛋白質構造構築の原理が完全に解明されたわけではない現状においては、構造予測も構造情報利用も常に限定的な活用が求められており、それを超えた利用法は危険といえましょう。

今回、立体構造の予測技術および立体構造情報を利用した機能解析やドラッグデザインへの活用に関する現状と展望を総合的に討論することに致しました。2年に一度開催されるCASP会議は現状の各種立体構造予測手法の有効性を検証する貴重な機会であり、最近では2004年12月にイタリアで開催されました。演者のうち2名の方々から2004年12月の最新のCASP会議の情報提供も頂きます。

本分野の専門の方々は勿論他分野からも多数の方々のご参加をお待ち申し上げます。事前登録は不要です。

なお本研究会の推進にあたり、会員の皆様のご意見を広く募集したいと考えております。皆様のご意見、ご質問、ご要望などを学会事務局(jimu@jsbi.org)までお知らせ頂ければ幸いです。

