CBI学会2020年大会

2020/10/29

第22回 FMO 研究会

FMO データベースの紹介と解析チュートリアル

星薬科大学

福澤薫

FMO データベースの紹介と解析チュートリアル

1.はじめに
福澤 薫（星薬科大学）

2.「FMODBの開発および相互作用データ解析」
高谷 大輔、神坂 紀久子（理化学研究所）

3.「COVID-19特集の紹介」
本間 光貴（理化学研究所）

＜チュートリアル＞

4. 「FMODBデータを用いたCOVID-19関連タンパク質の相互作用解析」
川嶋 裕介（星薬科大学）

5.「FMODBデータ対象とした相互作用クラスタリング解析」
関 祐哉　(株式会社テクノプロ　テクノプロR&D社)

6. 質疑応答

注意事項

◆ 質問について

質疑応答はまとめて行います。
質問等がある方は、随時チャットに記入してください。
質疑応答の時間に座長が読み上げます。

◆ マイク、カメラOFFのお願い

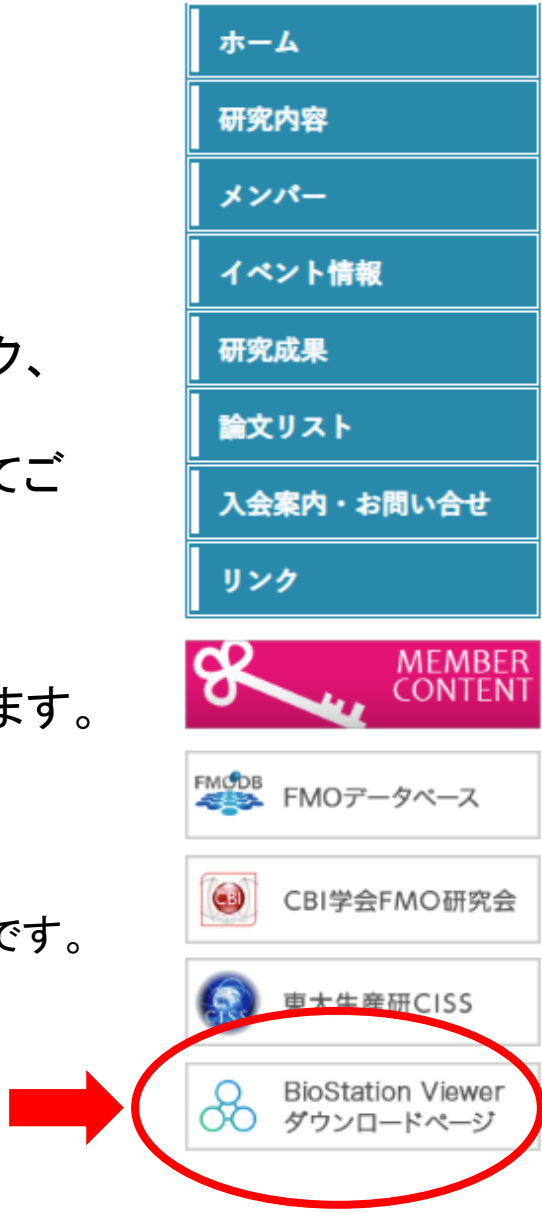
本セッションはZoomの双方向で進行しています。参加者はマイク、カメラをOFFにしてご参加ください。
講演者からの問いかけがあった場合等は適宜ミュートを解除してご対応ください。

◆ 資料・ソフトウェアのダウンロード

FMO創薬コンソーシアムのホームページからダウンロードできます。
https://fmodd.jp/biostationviewer-dl/
・BioStation Viewer
・講演資料
※ Google Colaboratoryでの作業を行います。Googleアカウントが必要です。

◆ アンケートのお願い

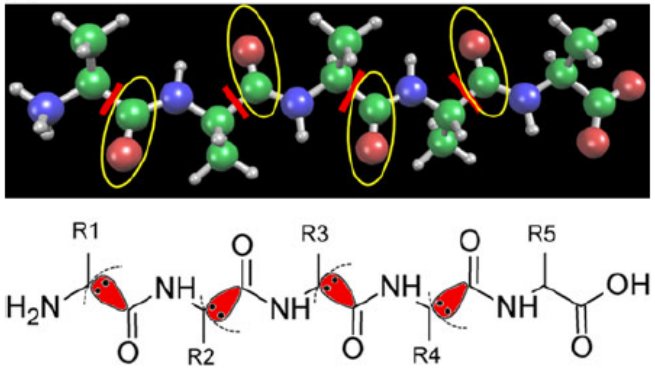
Zoomの投票機能を用いたアンケートを行います。
ご協力お願いします。



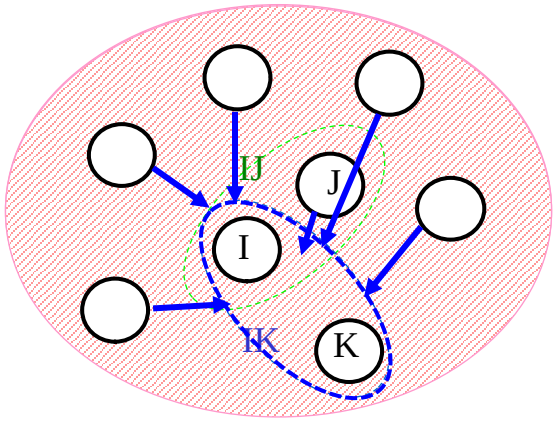
フラグメント分子軌道法(FMO法)とは？

- 1999年に北浦和夫教授により提案された full QM手法
- 巨大分子をフラグメントに分割し、部分エネルギーを集積することで、系全体の高速電子状態計算を実現
- 相互作用解析に適している

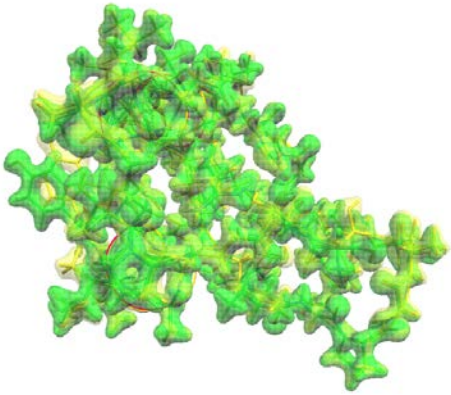
①巨大分子をフラグメントに分割



②環境場中でモノマー、ダイマーのエネルギーを計算



③タンパク質全体の電子状態が得られる



全エネルギー:

$$E \cong \sum_{I>J} E_{IJ} - (N_f - 2)\sum_{I} E_{I\,:\,\mathrm{a}\,\mathrm{l}} = \sum_{I} E'_I + \sum_{I>J} \Delta\tilde{E}_{IJ}$$

分子内・分子間の相互作用を定量的に解析

フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE, PIE)

分子間相互作用とPIEDA成分の関係

$$\Delta E_{IJ}^{\mathrm{FMO}} = \Delta E_{IJ}^{\mathrm{ES}} + \Delta E_{IJ}^{\mathrm{EX}} + \Delta E_{IJ}^{\mathrm{CT+mix}} + \Delta E_{IJ}^{\mathrm{DI}}$$

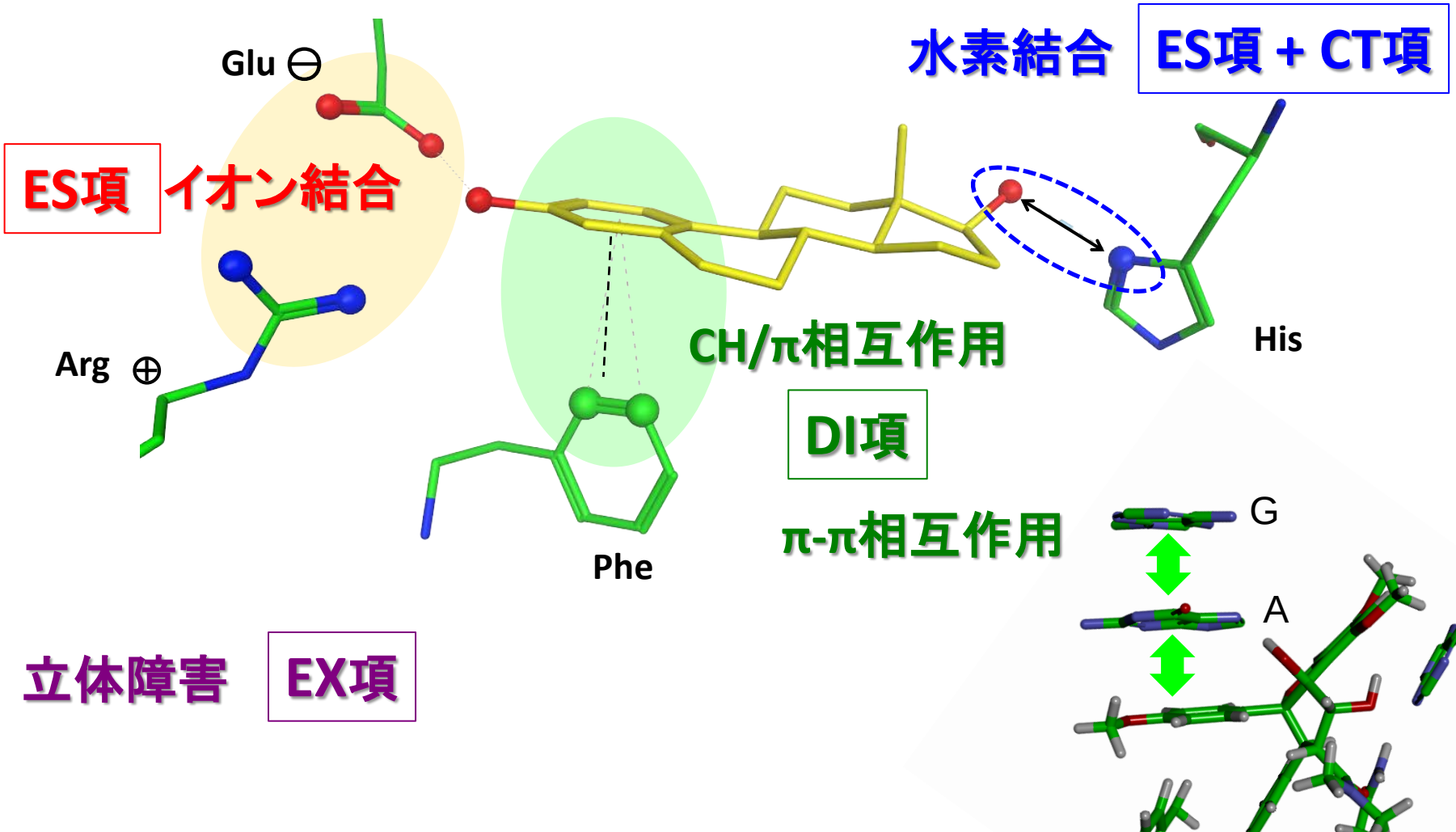
IFIE(MP2) or PIE

静電相互作用

交換反発相互作用

電荷移動相互作用

分散力相互作用



産学官連携で実用的なFMO創薬技術を開発する

HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築

（課題番号hp200101）

- 酵素WG
- 受容体WG
- 抗体・中分子WG
- 応用開発WG
- FMO開発WG
- 構造生物WG
- 製剤WG
- シミュレーション連携WG

FMO創薬コンソーシアム

FMODD consortium since 2014

大学・研究所 15機関
製薬企業 17社
IT企業 4社

HPCI

計算プログラムの提供 ⇄ 成果のフィードバック

評価指導

ABINIT-MP開発機関

HPCI戦略プログラム（分野４）、ポスト京プロジェクト（重点課題6）

東京大学生産技術研究所
立教大学・東京大学

アドバイス機関

医薬基盤研、理研、産総研、大阪大学、横浜市大、近畿大学、東京大学、他

全エネルギー
原子電荷
IFIEPIEDA

	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
FMO計算実施構造数	500 複合体	1,000 複合体	1,800 apo/複合体	～2,000 結晶構造 MD構造	～10,000 X線、Cryo-EM, Docking, MD COVID-19

FMODB

FMOデータベース

FMO創薬コンソーシアム　入会のご案内

FMO法に基づくインシリコ手法を、実用的な技術として発展させるための集まり

https://fmodd.jp/

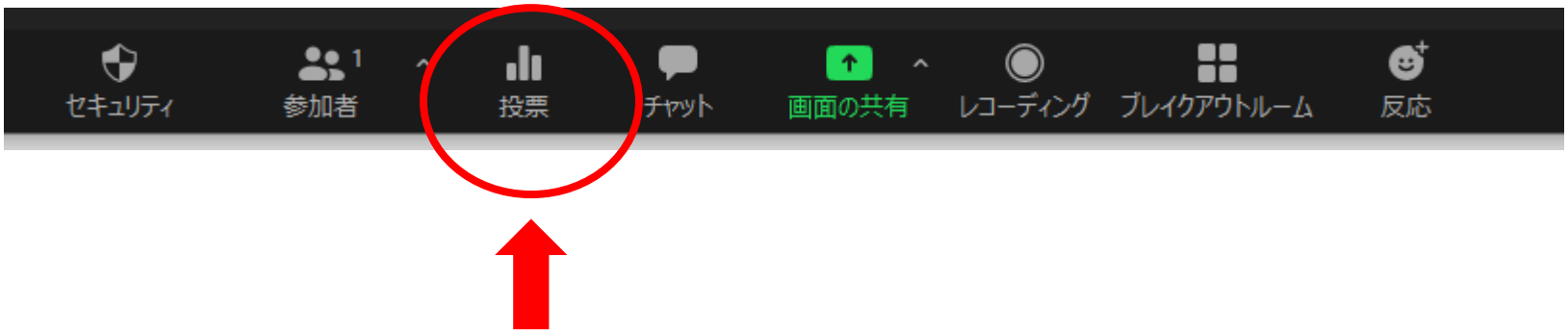
代表：福澤薫（星薬科大）
副代表：本間光貴（理研）、
小沢知永（キッセイ薬品工業）

メンバー：アカデミア18、製薬企業13、IT企業4（100名以上）

- 年2回の全体会議、年2回のリーダー会議、他
- FMO法利用ノウハウの共有
- 新規研究テーマの検討
- **HPCIの利用**
- **FMOデータベースの構築**

- 酵素WG
- 受容体WG
- 抗体・中分子WG
- 応用開発WG
- FMO開発WG
- 構造生物WG
- 製剤WG
- シミュレーション連携WG

アンケートにご協力ください



◆ 設問5つ、選択式です。

その他、ご質問や問い合わせがある方は
fmodb_contact@ml.riken.jp
にご連絡ください。

お疲れ様でした。