

連携機関のお知らせです

新薬の候補となる化合物をスピーディーに発見 バーチャルスクリーニングをご存じでしょうか？

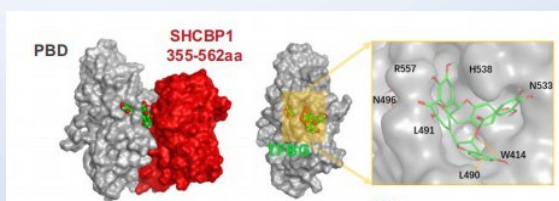
TargetMolは、コンピューター支援薬物設計 (Computer-Aided Drug Design, CADD)

サービスにより創薬開発の最前線に立っています。従来の医薬品開発は時間と労力を大量に消費するプロセスであり、網羅的な実験が必要なことから、しばしば進行が妨げられることがあります。本セミナーはTargetMolのCADDに関する専門知識を活用し、コンピューター上のバーチャルスクリーニングにより、薬剤候補分子とその標的タンパク質の間の複雑な相互作用を予測します。これらの分子結合をシミュレーションおよび分析することで、有望な化合物を迅速に特定し、医薬品開発のスケジュールを大幅に短縮することができます。

最初の発見から成功する薬剤候補に移行するプロセスがより効率的になり、薬剤設計の領域に革命をもたらします。

成功例:

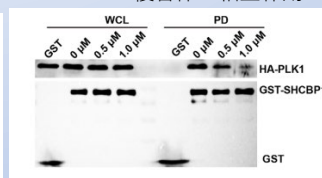
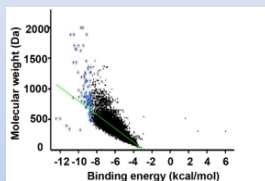
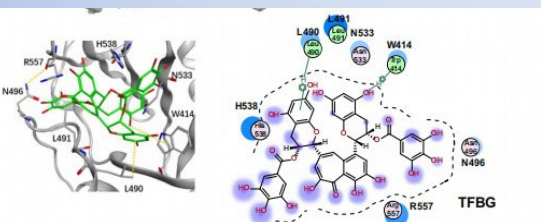
バーチャルスクリーニングにより、約17,000個の化合物からPLK1-SHCBP1に結合する可能性のある87個の化合物を取得しました。SPRによる実験の結果、40個の化合物に結合活性があることがわかりました。



計算モデルとTFBGとSHCBP1-PLK1複合体の相互作用

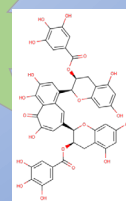
Topscience
Database
17,676
化合物

40化合物



左: ヒット化合物であるTFBGとPLK1-SHCBP1が結合した複合体の全体構造 (緑色、灰色、赤色)
中: CADDによって分析された、PLK1と17,676個の低分子の親和性の結果。binding energy > -8.6 kcal/molの化合物 (青色) を選択した。
右: 0.5 μM または 1 μM TFBG 処理後の SHCBP1 と PLK1 の相互作用のプルダウン アッセイ。

ヒット化合物
TFBG



様々な検討の結果、SHCBP1-PLK1 相互作用の阻害剤候補として、1つの天然由来化合物の取得に成功しました。(Kd=0.467UM)

Shi, W., Zhang, G., Ma, Z. et al. Hyperactivation of HER2-SHCBP1-PLK1 axis promotes tumor cell mitosis and impairs trastuzumab sensitivity to gastric cancer. Nat Commun 12, 2812 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23053-8>

プレゼンター: 劉 順俊 (TargetMol Chemicals Inc.) アプリケーションスペシャリスト

開催日時: 12月18日 (月) 17:00~18:00

開催方法: Webセミナー (Microsoft Teams)

セミナー・デモ共通 下記のURLもしくは右記QRコードから申し込みフォームにアクセスしてください。 <https://forms.gle/uLeyZkYuYCSEXcKdA>
セミナー申し込み締切12月15日(金)17:00

フォームで申し込みの方にセミナーIDをお知らせします。オンデマンド配信希望はセミナー後も引き続き受け付けております。電話での受け付けはしていません。
記入内容は協力企業と情報共有させていただきます。
協力企業からの連絡のみを希望される場合もフォームからご連絡ください。

◆問合せ先◆

学内: 共同利用研究室中央機器管理部門担当: 藤原 (4N5)
chuokiki-office-group@keio.jp

<https://sites.google.com/keio.jp/corr-cf/home>

メーカー: TargetMol 劉 順俊 jp.support@targetmol.com

<https://www.targetmol.jp/>

2023/11/1~2024/1/31化合物ライブラリー
30%OFFキャンペーン中!

<https://forms.gle/uLeyZkYuYCSEXcKdA>



LeyZkYuYCSEXcKdA

有志の大学共同利用施設がゆるやかに連携して活動しています。学部・大学・機関の壁を越えてふってご参加ください。