

## Core2Core プログラム 出張報告書

### [出張者]

中原 景子

早稲田大学大学院 先進理工学研究科 生命医科学専攻

武岡研究室 修士1年

### [訪問先]

Bonn university、Bonn-Aachen International Center for Information Technology (b-it)、  
ドイツ、ボン

### [滞在期間]

2017年9月3日(日)～2017年9月20日(水) (15泊18日)

### [概要]

本出張では、ボン大学の研究機関である Bonn-Aachen International Center for Information Technology (b-it)の Bajorath 研究室を訪れた。Bajorath 研究室は製薬研究のための計算方法の開発と大規模なデータマイニングを目的としている研究室であり、創薬のための分子シミュレーションソフトウェア Molecular Operating Environment (MOE)を用い低分子とタンパクの Docking 技術を学んだ。また、本プログラムの最終日には2週間の研究報告をボン大学と早稲田大学の教授や学生と行った。

以下に具体的なスケジュールを記す。

2017年9月3～4日：日本からドイツへ移動

2017年9月5～17日：Bajorath 研究室にて MOE を用いた Docking シミュレーション

2017年9月18日：研究報告会

2017年9月19～20日：ドイツから日本へ移動

### [総括]

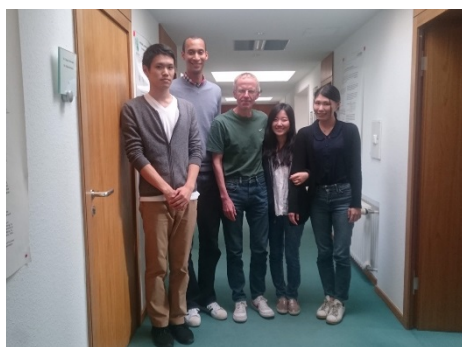
本出張では、シミュレーションにおける Docking 技術を学ぶことを目標に MOE を用いた実験を行った。これまでシミュレーションを行ったことはなかったが、所属研究室で扱うリポソームの構成脂質と受容体との相互作用能をシミュレーションにより解明することが可能であれば所属研究室に有用な技術であると考え、Bajorath 研究室でシミュレーションを学んだ。まず始めに MOE の Docking プログラムの正確性を確認する Redocking 技術、タンパク構造のわずかな差異によるリガンドとの Docking の差を検証する Cross-docking 技術を学んだ。シミュレーションに馴染みがない私にとって操作や考え方など全てが新鮮で理解するのが難しかったが、スーパーバイザーや研究室の方の指導によりタンパク-リガンド複合体をデータベースから得て Docking するための基礎的な知識や技術を得られた。次に、学んだ知識を用いて 100 個のリガンド候補からタンパクに対する 9 個の活性化リガンドの同定を行った。リガンドの同定を行う中で、様々な種類の Docking から同定に適している Docking を選択する考え方、得られた結果の分析方法を学んだと同時に、Docking

の種類や分析方法に一つの正解はなく様々な方法を試した上で適切な同定を行う必要があることが分かった。最後に 2 週間で学んだ技術を用いて所属研究室で合成した 3 種類のリポソーム構成脂質とタンパクとの Docking を行い、タンパクとの相互作用が高い脂質の同定を試みた。しかし、様々な Docking を行ってもタンパクと脂質間の相互作用の有意差は得られなかった。この原因として MOE では低分子とタンパクの Docking を専門としているのに対し脂質は分子量が大きすぎることで、脂質が相互作用すると考えられるタンパク部位がポケットに覆われていないことなどが考えられる。そのため、脂質の全分子ではなくタンパクとの結合部位のみの低分子を用いて Docking を行うことで有意な結果が得られると考える。

また、ボンでの研究生生活を通して、研究者がメリハリのある生活を送っていることに感心した。朝早くに研究室に来て、研究中は私語などをせず短時間でやるべきことを終わらせ、夜はプライベートの時間を過ごしているよう感じた。ランチタイムやコーヒブレイクではしっかりと休憩をとり、それ以外の時間は集中して研究を進めるという姿勢を見習って自分のこれからの研究生生活時間を見直そうと思う。

以上に述べたように 2 週間という短い期間ながら、私にとって未知の世界であったシミュレーションを一から学び基礎的な技術を得ることができた。今回の有意義な経験を活かし、これからも研究に励みたいと思う。

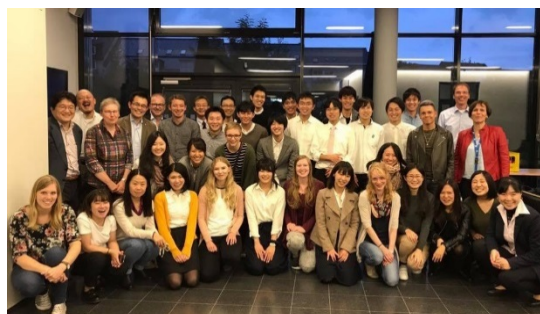
以下に滞在中の写真に掲載する。



Bajorath 教授、スーパーバイザー Andrew と



Bajorath 研究室の方々と



研究報告後の集合写真