

# 新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算

望月祐志 (立教大学)

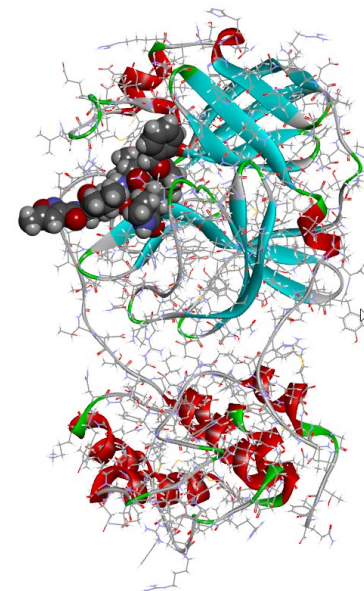
## ■実施体制と目的

望月祐志(立教大学)が代表統括となり、理論創薬の専門家である田中成典(神戸大学)と福澤薫(星薬科大学)らと密接に連携する。自主開発してきたABINIT-MPプログラムを用い、新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行い、得られたデータを公開する。

## ■これまでのエビデンス

ABINIT-MPは理論創薬分野で解析ツールとして十数年に渡って使われており、「京」の上では福澤が主催するFMO創薬コンソーシアム(FMODD)活動も展開された。今回の件でも、主要プロテアーゼと阻害剤N3のPDBでの構造[右図参照]公表直後から、名大FX100を用いた計算を行い、一連の解析とChemRxivでの論文公開を一ヶ月で達成した。知見として、阻害剤と相互作用する重要残基群の特定[右下図参照]、と阻害剤の改良指針が得られた。

[https://chemrxiv.org/articles/Fragment\\_Molecular\\_Orbital\\_Based\\_Interaction\\_Analyses\\_on\\_COVID-19\\_Main\\_Protease\\_-\\_Inhibitor\\_N3\\_Complex\\_PDB\\_ID\\_6LU7\\_/11988120/1](https://chemrxiv.org/articles/Fragment_Molecular_Orbital_Based_Interaction_Analyses_on_COVID-19_Main_Protease_-_Inhibitor_N3_Complex_PDB_ID_6LU7_/11988120/1)



## ■実施予定内容

①上記のプロテアーゼ等、新型コロナウイルス(SARS-CoV-2/COVID-19)に関連するタンパク質と阻害剤候補群に対する探索的計算と解析(構造ゆらぎ等も考慮)、②類縁のSARSウイルス関係のタンパク質に対する同計算・解析、③重要な計算結果データのFMODB(FMOデータベース)での公開

## ■期待される成果

①阻害剤と残基群の相互作用情報に基づく候補選別に関する補助情報の取得、②新規阻害剤開発に資する基礎情報の演繹、③機械学習等のデータ科学的解析への情報提供

