# Newsletter for Chem-Bio Informatics Society Members

# GBI NEWS

# 情報計算化学生物学会 広報誌

No. 2 2008 (2008年4月18日発行)

# 脚光を浴びているミトコンドリア研究

## - CBI 学会新年度の第1回研究講演会-

ご存知のように、この4月よりメタボリック シンドローム症候群対策には国を挙げて取り組 むことになりました。しかし、現代医学はま だ、メタボリックシンドローム症候群や生活習 慣病の全貌を捉えきれていません。現代医学そ して生命科学は、分子経路網(遺伝子、たんぱ く質、細胞内のそれらの相互作用) の理解を基 盤としています。この視点から見た時、我々の 理解はまだ適切な対策を考えるには不十分だと 言わざるをえません。現在の医薬品、予防のた めの食品や補助食品、運動、カロリー制限、生 活様式の工夫が本当にその効果を発揮するため には、CBI学会がめざす「分子から考える」視 点がどうしても必要です。幸いわが国には、こ のような視点に立った、優れた研究をしている 研究者、またその成果を医療や保健の実践に移 管しようと努力されている、優れた専門家が多 数おられます。CBI学会は、研究講演会や年次 大会でこうした優れた専門家の仕事を紹介し、 これを 医薬品や予防手段の開発に関わってい る専門家に紹介し、お互いの間に交流が生まれ ることのお手伝いをしたいと考えております。

新年度最初の「治療標的としてのミトコンドリア」も、上記の考えによって企画しました。これまでミトコンドリアの研究は、やや特殊な分野とみなされてきました。しかし、現在は、代謝疾患、老化と抗加齢、さらには医薬品のルーティンの毒性試験にも深く関係していることがわかってきています。したがって、ミトコンドリアの最新の知識は、現代医学や健康科学、医薬品開発の「常識」とならなければならない時代になっています。なお、そうした新しい常識をやさしく解説しているのが、昨年出版されました「ミトコンドリアのちから」(瀬名秀明、太田成男著、新潮文庫、590円)です。専

門家でない方は、ぜひこれを読んで、講演会にご 参加ください。なお著者の一人、太田成男氏は、本 講演会の最初の講師です。

## 専門家のための参考文献

- M. R. Duchen, Mitochondria in health and disease: perspective on a new mitochondrial biology, Molecular Aspects of Medicine, 25:365-451, 2004
- S. Calvo, et al., Systematic identification of human mitochondria disease genes through integrative genomics, Nature Genetics, 38(5): 576-582, 2006.
- ·A. Wiederkehr, C. B. Wollheim, Implication of Mitochondria in insulin Secretion and Action, Endocrinology, 147(6): 2643-2649, 2006.
- · G. Hajnoczky, J. B. Hoek, Mitochondrial Longevity Pathways, Science, 315:607-609,2007.
- J. A. Dykens, Y. Will, The Significance of mitochondrial tocixity testing in drug development, Drug Discovery Today, 12(17/18): 777-785, 2007.

(上記のいくつかの論文はインターネットから無料 でダウンロードできます)

講演会「治療標的としてのミトコンドリア」世話人 神沼二眞

# 次回研究講演会のお知らせ

第285回CBI 研究講演会 「分子力場法の現状と今後の展望 分子設計へ如何に活用するか?」

#### 開催趣旨:

分子力場(あるいは経験的力場)は、医薬分子のような小分子から蛋白質のような巨大分子までの立体構造の推定、構造に基づいた機能や反応のシミュレーション、そして新しい分子の創出を目指した分子設計などを行う上で、現在では必須かつ極めて有用な基本的データないし手法になっています。分子力場なしには、現在の分子設計や分子科学は遂行できないと言っても過言ではありません。しかし、分子力場で用いられる諸量や関数形は、物理定数や物質の熱力学的諸量のように確定している訳ではなく、実際にそれらを有効に活用するためには、個々の力場の意味や特性を理解する必要があります。一方、力場を応用する観点で現状をみると、創製すべき分子機能に対する要求レベルの高まりに伴い、より精緻かつ高次元の分子シミュレーションが必須になりつつあります。こうしたニーズを満たすためには、より高精度の分子力場の開発とそれらを有効に運用できるシステムの開発が求められています。今回の研究講演会では、分子力場の基本的な仕組みや歴史、分子設計や分子シミュレーションに使う上での問題点とその回避の仕方、そして新しい力場開発の現状について、各分野で活躍されている研究者をお招きして、お話して頂くことにします。力場を毎日のように活用している方々は勿論、これから力場を使って分子シミュレーションを行いたいと思っている方々(特に若い方々)のご参加を期待しています。

日時:2008年5月30日(金)13:30-17:30

場所:日本化学会化学会館7F ホール

東京都千代田区神田駿河台1-5(JRお茶の水駅下車、徒歩4分)

世話人:平山令明 (東海大学・医学部)

#### プログラム

1. 13:30-13:40 はじめに

2.13:40-14:40 「分子力場の基本と歴史的な背景、そして分子設計への応用」中田吉郎 (群馬大学・工学部)

- 3. 14:40-15:40 "Unified force field model for pharmaceutical ligand affinity computation" 藤谷秀章 (富士通研究所ナノテクノロジー研究センター)
- 4. 16:00-17:00

"How to make a force field to cover massive number of pharmaceutical molecules?"
Huai Sun (上海交通大学化学化工学院; AEON Technology Inc.)

5. 17:00-17:30 総合討論

講演会参加費: 法人賛助会員: 無料

個人会員(非営利):無料 個人会員(一般企業): ¥5,000 ビジター(非営利): ¥1,000 ビジター(一般企業): ¥10,000

出席を希望される方は事前に必ず事務局セミナー受付 seminar@cbi-society.org に連絡してください。

連絡先:CBI学会事務局 セミナー受付 E-mail: seminar@cbi-society.org

〒 158-0097 東京都世田谷区用賀 4-3-16 イイダビル 301

TEL: 03-5491-5423 FAX: 03-5491-5462 http://www.cbi.or.jp/

# 今後の研究講演会予定

◇第 286 回 CBI 学会研究講演会 (2008 年 6 月 25 日) (予定)

「Pathway 解析システム」(仮)

世話人:勝山マリコ (富士通)、藤原巌 (大日本住友製薬)

◇第 287 回 CBI 学会研究講演会 (2008 年 7 月 14 日)

「臨床における薬物間相互作用の予測のための方法論;代謝酵素、トランスポーター」 世話人:杉山雄一(東京大学)、前田和哉(東京大学)

- 8月 Informatics の frontier: 生物医学と創薬研究を支援する情報と知識の整理(仮題)
- 9月 RNA研究の進歩と創薬へのインパクト
- 10月 半経験的分子軌道法(仮題) Stewart 博士(Seiler 研究所)、他

世話人:平山令明(東海大学)

## <CBI 学会 2008 年大会>

## CBI 学会 2008 年大会広告・企業展示・ランチョンセミナースポンサー募集

テーマ: 「疾病経路網からの疾患と創薬

ーとくに核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患に焦点を当てて」

#### 〈1〉企業展示

期間:10月22日(水)~24日(金)(3日間)会場学術総合センター中会議場(4室一体利用)

\*同会場にてポスター発表開催、その外の廊下も使用可能

設備: 長机(180cm×60cm)をパネル(90cm×210cm)で囲むブース、椅子1脚

費用:30万円、募集数:25ブース

\*予稿集への広告を含みます。

\*電子機器の使用に若干の制限があります。(設置機器の規模、消費電力等)

#### <2>予稿集への広告掲載(掲載ページサイズ·印刷費用)

- ① 本文内広告ページ(後付)※A4版/白黒2ページ(両面1枚)5万円
- ② 裏表紙 A 4 版 / カラー10 万円
- ③ 表紙見返しA4版/カラー8万円
- ④ 裏表紙見返しA4版/カラー8万円
- ①~④ 入稿形式:版下フィルム、またはPDF、イラストレーター等の電子ファイル ※カラーページ、増ページに関しましては事務局までご相談ください

#### <3>ランチョンセミナー

日時:10月22日(水)~24日(金)のいずれか1日11:45~13:00 (準備、片付けも含む)

会場:学術総合センター特別会議室(3室一体利用)

費用:未定

\*各日のテーマに合わせて日にちをお選びいただけますが、申し込み順となります。 \*テーマは決まり次第、ホームページにてご案内いたします。

#### 〈4〉寄付•賛助金

一口5万円

\*\*\*\*\* お申込みは電子メールにて事務局までご連絡下さい \*\*\*\*\* Eメール:cbi-staff@cbi.or.jp

詳しい内容につきましてはCBI学会ホームページをご覧下さい。

# CBI 学会 2008 年大会 概要

- 1. 開催日時: 2008年10月22日(水)~24日(金)
- 2. 開催場所:学術総合センター(一橋記念講堂他)千代田区一ツ橋2丁目1番2号
- 3. 課題: Pathway/Network to Disease & Drug Discovery Specially Focused on Nuclear Receptors and Metabolic Syndrome (疾病経路網からの疾患と創薬—とくに核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患に焦点を当てて)
- 4. 大会実行委員長 岡崎康司 (埼玉医科大学ゲノム医学研究センター)
- 5. 開催趣旨

現在 CBI 学会は生物医学や創薬への情報計算(Informatics & Computing)技法の応用を学会の重要なミッションとしているが、ポストゲノム(シークエンス)時代といわれる現在、生物医学や創薬が必要としている情報計算技法は明らかに、拡大変化している。その一つの方向は米国の NIH が主導している、「生物医学の重要な問題領域の解決に情報計算資源を集中する」というやり方である。「Pathway/Network to Disease & Drug Discovery - Specially Focused on Nuclear Receptors and Metabolic Syndrome をテーマとするこの大会では、「社会的に大きな問題となっている生活習慣病(メタボリック症候群)問題の解決に情報計算からの資源や研究者を集中する」という理念を具体的に追求することをめざしている。しかし、各セッションでの話題は CBI 学会の 7 つの関心領域との対応がつくように配慮されている。この意味で参加者は「核内受容体と生活習慣病」だけでなく、生物医学と創薬への新しい情報計算技法一般に関心のある幅広い研究者にも興味深くなるように配慮しており、生物医学、創薬、情報計算学、など幅広い研究者の参加を期待している。

## 6. プログラム(案)

主な講演予定者:門脇孝(東京大学医学系研究科),加藤茂明(東京大学分子細胞生物学研究所) Barry Forman (The Beckman Research Institute at The City of Hope National Medical Center), Donald P. McDonnell (Duke University Medical Center), Sean Ekins (Arizona Commodity Traders, LLC & Univ. of Maryland), Bruce Blumberg (Department of Developmental and Cell Biology, University of California, Irvine), Ruben Abagyan (The Scripps Research Institute, Molecular Biology), J. Auwrex (Institute of Genetics and Molecular and Cellular Biology)

#### 22日 (第1日目)

K: 基調講演・主テーマ「核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患」解題

L1: ランチョンセミナー(1)

S1: 核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患研究の最新の話題

## 23日 (第2日目)

S2: e-ADME/Tox と核内受容体および関連転写因子

S3: オミックスと経路網:核内受容体とメタボリック症候群および関連疾患

## 24日 (第3日目)

S4: 先端的な計算創薬技法と選択的核内受容体デザイン

L3: ランチョンセミナー(3)

S5: メタボリック症候群と関連疾患の新しい治療標的