

In silico 手法を用いたシグナル伝達分子に対する化合物の選択性についての研究
A study on the selectivity of compounds for signaling molecules using in silico techniques

京都大学 薬学研究科 薬理ゲノミクス・ゲノム創薬科学分野 平澤 明

研究成果概要

共同研究の成果として、発表論文「Analyses of the onset mechanisms of cardio-stimulatory action by aciclovir.」において、AutoDock Tools (ADT) v1.5.6 を用いて molecular docking を行い、aciclovir をはじめとした数種類の化合物の PDE1A 及び PDE1C、PDE3A に対する親和性や結合ポーズを予測した。また、molecular docking を行うために必要なタンパク質の立体構造を得るために、PDE1B の X 線結晶構造を鋳型として PDE1A と PDE1C のホモロジーモデルを Modeller 10.4 を用いて作成した。

発表論文(謝辞なし)

- Goto A, Kambayashi R, Chiba K, Shinozaki M, Moritani K, Izumi-Nakaseko H, Takei Y, Hirasawa A, Sugiyama A. Analyses of the onset mechanisms of cardio-stimulatory action by aciclovir. J Pharmacol Sci. 2024 Apr;154(4):294-300. doi: 10.1016/j.jphs.2024.02.005. Epub 2024 Feb 8. PMID: 38485347.