

創薬センターセミナー

亀田 倫史 上級主任研究員

産業技術総合研究所

分子動力学シミュレーション・機械学習を  
組み合わせた新型コロナウイルス進化予測

12月8日(月) 16時から  
北海道大学薬学部 臨床薬学講義室

新型コロナウイルスは、武漢株を発端として、 $\alpha$ 、 $\beta$ …オミクロン、そして現在オミクロン株の派生型であるXEC株までの進化が確認されている。これまで、武漢株からオミクロン株に進化する過程で、スパイク(S)蛋白質のレセプター結合領域(RBD)が徐々に正に荷電していくことが知られている。この理由の一つとして、ヒト細胞の表面にある糖鎖であるヘパラン硫酸(負に帯電)への結合能を高めることで、感染効率をあげているとする解釈がある。そこで、新型コロナウイルスのS蛋白質RBDと、糖鎖の一種であるヘパラン硫酸との結合能に着目し、S蛋白質の進化を予測するシステムを開発した。

当日は、システムの解説と実際にXEC株に適用した例について報告する。

主催 北海道大学大学院薬学研究院創薬科学研究教育センター

共催 日本生物物理学会北海道支部

連絡先:

北海道大学薬学部 生体分子機能学研究室

secretary\_kinou@pharm.hokudai.ac.jp, 011-706-3764