

苦味を抑える薬の理論設計

大阪大学 薬学部 福永陽奈、増田綾華、白倉花野、三木理紗子、安田光輝、渡邊美咲

目的: 苦味受容体TAS2Rの生理学的機能に基づき、薬の苦味を緩和する効果的なアンタゴニストの開発

内容: 苦味受容体TAS2R46(PDB ID:7xp5)を標的としたアンタゴニストの理論設計のためFMO法などにより相互作用エネルギーの評価を行った。

結果: 苦味を感じる化合物はTrp88と周辺残基と強い相互作用を形成し、苦味を感じない化合物はTyr241と周辺残基と強い相互作用を形成することがわかった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
計算に使ったCPU 時間: 51000ノード時間
使用したソフトウェア: abinit-mp 1.22

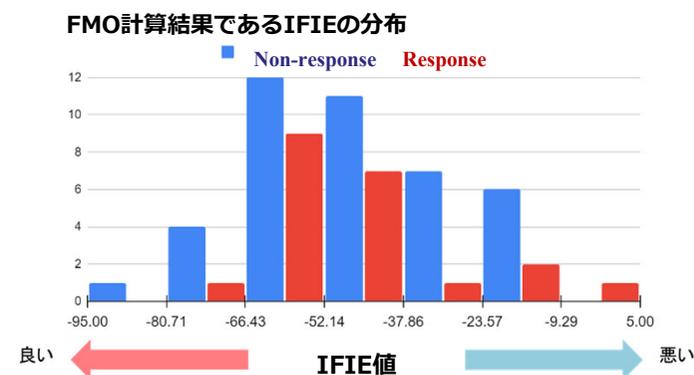


図 (FMO計算結果)