

Gタンパク質共役受容体(GPCR)が複数種のGタンパク質と結合する仕組みを解明

トロント大学などとの共同研究において、薬物標的となるGPCRの一種であるヒトのアデノシンA_{2A}受容体(A_{2A}R)が複数種のGタンパク質と結合して活性化する仕組みを解明した。A_{2A}Rは、Gタンパク質と結合して細胞シグナル伝達を開始し、心臓の健康状態や、炎症・がん・脳疾患に影響を与えている。A_{2A}Rが特定の立体構造を巧妙に制御する長距離情報伝達の詳細なメカニズムを数理剛性理論を用いて発見した。計算やAIに基づいたGPCRの活性化メカニズム研究や新世代の創薬を可能にすると期待される。

Sljoka et al., Nature Chemical Biology, 2025

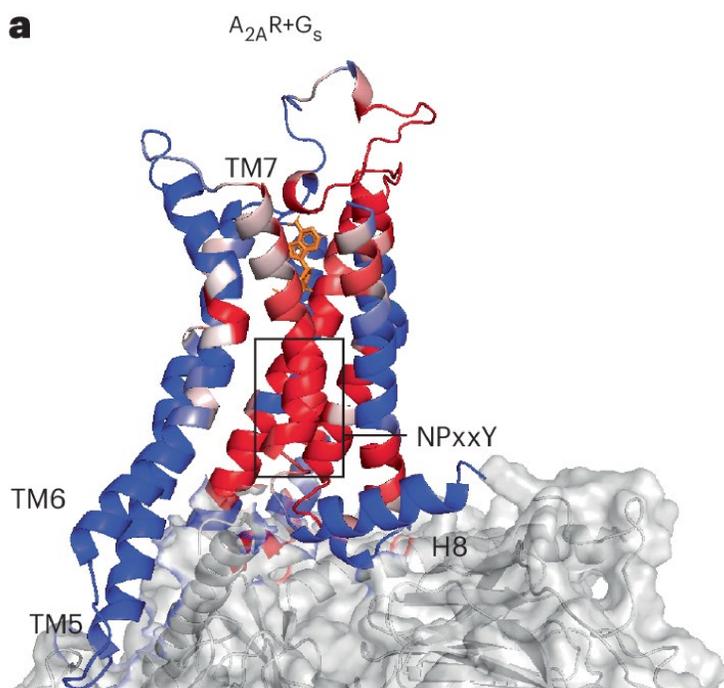


図: G_sタンパク質と結合する際の遠距離情報伝達経路

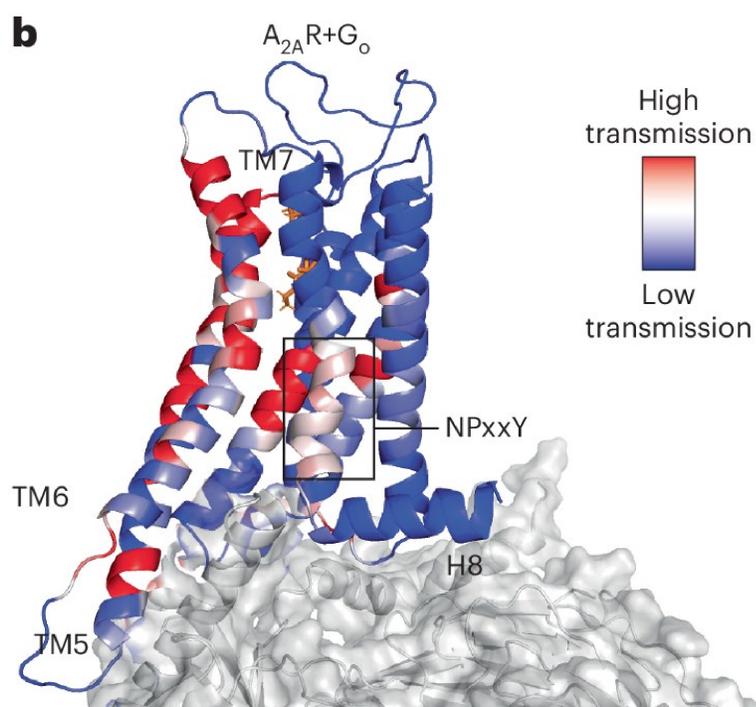


図: G_oタンパク質と結合する際の遠距離情報伝達経路

QCforever2: 自動的な量子化学計算

QCforever2は、GaussianやGAMESSなどの量子化学計算ソフトウェアを用いて、クラスタマシン上で、分子の様々な物性を同時計算するためのpythonパッケージである。ChemTSv2などの、AI分子生成アルゴリズムと組み合わせることで、新たな物性を持つ分子の開発を行うことができる。基本的な物性に加え、NMR chemical shift, ionization potential, transition energy to excited states, fluorescenceなどの高度な物性の計算も可能である。

Sumita et al., J Comp Chem, 2025.

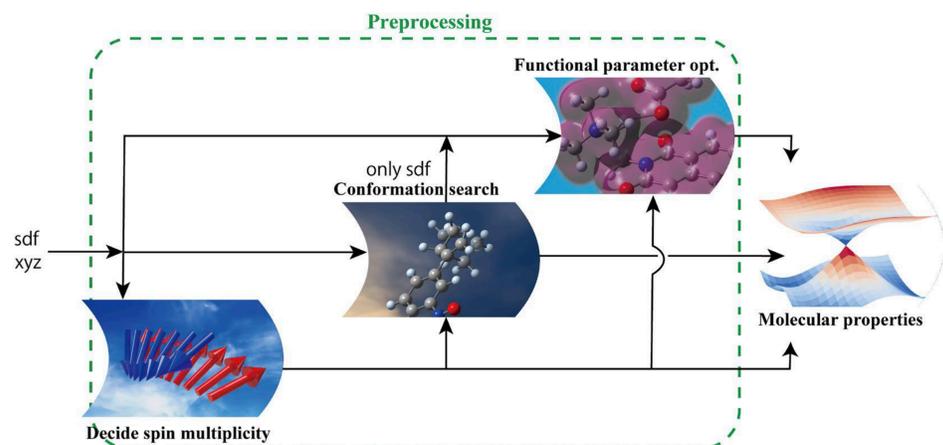


図: QCforever2の計算フロー

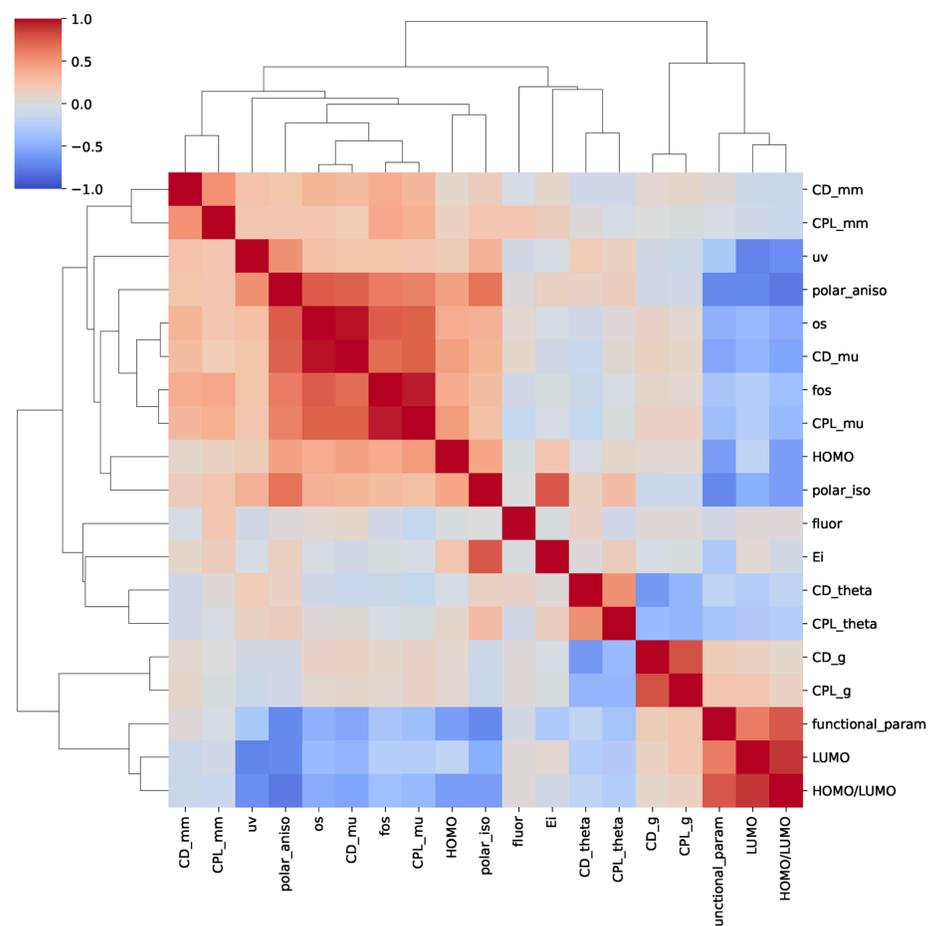


図: QCforever2で計算された様々な物性の相関と、それに基づくクラスタリング結果