

2026年5月21日(木)

【担当教員】

広島市立大学情報科学研究科 齋藤徹准教授

【事務局】※担当教員へお取り次ぎします。

広島市立大学事務局教務・学部運営室

担当：学部運営グループ 茶木

電話：082-830-1501(直通)

## 医薬品の効果を予測する分子シミュレーション技術を構築

情報科学研究科 齋藤徹准教授、清水良真氏(同大学院生)、鷹野優教授は、最先端の分子シミュレーションを用いて、炭酸脱水素酵素阻害薬の効果を予測できることを明らかにしました。本研究は、英国王立化学会の国際学術雑誌『Physical Chemistry Chemical Physics』に掲載され、グラフィカルデザインが裏表紙(Outside Back Cover)に選出されました。

### <本件の概要>

炭酸脱水素酵素は活性部位に亜鉛(II)イオンを含有する金属酵素です。緑内障やがん治療の標的タンパク質として長らく研究されており、その機能を阻害する医薬品(阻害薬)候補化合物としてスルホンアミド誘導体が開発されてきました。阻害薬の効果は標的タンパク質への結合親和性で表され、解離定数( $K_D$ )、阻害定数( $K_i$ )、結合速度定数( $k_{on}$ )などを実験的に測定することで評価できます。本研究では、これらの実験データと量子/古典混合分子動力学シミュレーションから得られる活性化自由エネルギー、自由エネルギー摂動法から得られる相対結合自由エネルギーとの間に強い~非常に強い相関関係を見いだしました。本技術を発展させ、さまざまな阻害薬のデータを収集・計算して機械学習/深層学習モデルを構築することで、より優れた阻害薬の開発への貢献が期待されます。

### 【論文情報】

タイトル：Molecular Docking, MM/GBSA, FEP/MD, and DFT/MM MD Studies on Predicting Binding Affinity of Carbonic Anhydrase II Inhibitors

著者：Ryoma Shimizu, Yu Takano, Toru Saito\*

掲載誌：Physical Chemistry Chemical Physics, 2026, 28, 9183–9192.

DOI: 10.1039/D5CP04452A.

URL: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2026/cp/d5cp04452a>



Showing research from Dr Toru Saito and colleagues, Graduate School of Information Sciences, Hiroshima City University, Japan.

Molecular docking, MM/GBSA, FEP/MD, and DFT/MM MD studies on predicting binding affinity of carbonic anhydrase II inhibitors.

Human carbonic anhydrases II catalyze a variety of hydration reactions and are responsible for diseases including glaucoma and cancer. This work addressed whether modern computational methodologies can quantitatively predict the binding affinity and inhibitory potency of a set of sulfonamide. All MD-based methods especially reproduced the experimental equilibrium dissociation constants for benzene sulfonamide derivatives, and more importantly, FEP/MD was shown to be effective for applying to structurally diverse sulfonamides.

Image reproduced by permission of Toru Saito from Phys. Chem. Chem. Phys., 2026, 28, 9183.

Enabled by its Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International license. PCCP is co-owned by a group of chemistry, physical chemistry and physics societies from around the world who are represented by the Editorial Board and work alongside the Editorial Board and Authors Board. Meet the PCCP Owner Societies.

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

rsc.li/pccp  
ISSN 1463-9069

PCCP  
Owner Societies

As featured in:



See Toru Saito et al.,  
Phys. Chem. Chem. Phys.,  
2026, 28, 9183.