

AMED/BINDS インシリコユニットにおける創薬支援研究

Research activities for supporting drug discovery by *in-silico* unit of BINDS (AMED)

開催趣旨：

平成29年4月よりAMEDのプロジェクト「創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業」が開始されました。本プロジェクトでは、医薬品等の実用化に向けて、構造解析、タンパク質生産、ケミカルシーズ・リード探索、構造展開、ゲノミクス解析、インシリコスクリーニングなどの技術を有する最先端研究者の支援により、外部研究者の研究推進を強力にバックアップしています。本事業は、5つのユニットから構成されており、インシリコユニットは、その一つとして、計算科学や情報科学の最新の技術を駆使して、分子・細胞レベルから創薬・医療・生命科学等の重要課題に取り組む研究の支援と高度化を行っています。

本セッションでは、BINDSプロジェクトの最終年度として、9課題の中から、4課題について、課題代表者より、これまでのインシリコユニットの支援・高度化研究の成果を発表していただきます。

モデレーター： 広川貴次 Takatsugu Hirokawa
筑波大学医学医療系 生命医科学域

1. タンパク質の複合体構造・分子間相互作用・ダイナミクス・機能の予測と解析

寺田 透

Tohru Terada, Yuichi Yokoyama, Yoshitaka Moriwaki and Kentaro Shimizu

東京大学大学院農学生命科学研究科 Graduate School of Agricultural and Life Sciences, The University of Tokyo

2. タンパク質の高次構造情報を利用した創薬等研究加速に向けたバイオインフォマティクス研究

富井 健太郎^{1,2} Kentaro Tomii

1 産業技術総合研究所 人工知能研究センター Artificial Intelligence Research Center, AIST

2 産総研・東工大 実社会ビッグデータ活用オープンイノベーションラボラトリ RWBC-OIL, AIST-Tokyo Tech

3. 構造インフォマティクスとFMO計算を融合したインシリコスクリーニング支援研究

本間 光貴 Teruki Honma

理化学研究所 生命機能科学研究センター RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research

4. 分子モデリングおよびシミュレーションを活用したインシリコ創薬支援

広川 貴次 Takatsugu Hirokawa

筑波大学医学医療系 生命医科学域 Division of Biomedical Science, University of Tsukuba

「知って、使って、進むあなたの研究」

まずは、相談。☞ binds.jp にアクセス！

創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム
Basis for Supporting Innovative Drug Discovery and Life Science Research (BINDS)
ワンストップコンサルティング・支援窓口

支援コンサルティング申請

「支援コンサルティング」では、実際に研究支援を始める前に、想定される支援担当者や支援の実現性を話し合います。話し合いによって、技術的な問題などがないことを明確にしたうえで、支援申請をおこなっていただきます。コンサルティングに必要な情報を以下に記入していただきます。以下の欄には秘匿にすべき情報は書き添えてください。ここに記すのは、秘匿性のない情報（いわゆるノンコン）のみとしていただき、秘匿性を要する情報は、支援担当者と直接やりとりしていただくこととなります。

申請書の作成にあたって、「申請書の書き方ガイドンス」を一読いただき、お手元のワープロソフト等で文章を作成保存される事をおすすめします。入力情報の秘匿性を高めるために、ブラウザに情報ができるだけ残らないようにしております。そのため、「戻る」ボタンを押した際に、入力情報が消えていることがあります。

本申請内容は、プラットフォーム機能最適化ユニット支援オフィスがご希望の支援担当者に依頼しますが、支援内容によっては、別の支援担当者に依頼することもあります。コンサルティング申請完了後、コンサルティング担当者よりコンタクトがあります。お待ちください。数日経過してもコンタクトがない場合は、プラットフォーム機能最適化ユニット支援オフィスまで、ご連絡ください。

2018年10月より、全支援課題に対して、四半期報告（90日報告）をしていただくことになりました。詳細は、こちらをご覧ください。

コンサルティングから支援開始までの流れ | 申請書の書き方ガイドンス | よくある質問

お名前：
ご所属：
職位・肩書：
電話番号：
メールアドレス：
メールアドレス（確認用）：
支援を希望する主なユニット：
支援項目：
希望する担当者：
コンサルティング課題名：
関連AMED事業：
過去の支援案件の発展の場合は、以前の課題番号を入力してください。
コンサルティング課題内容：

選択してください
構造解析領域
タンパク質生産領域
ライブラリー・スクリーニング領域
構造展開領域
バイオロジカルシース探索ユニット
インシリコユニット
プラットフォーム機能最適化ユニット
選択してください

選択してください
超分子立体構造モデリング
天然生理活性物質探索
天然変性タンパク質
天然変性部位予測
実験データと連携したシミュレーション
全原子分子動力学シミュレーション
大規模分子シミュレーション
分子動力学シミュレーション
Gタンパク質モデリング
量子化学計算

インシリコスクリーニング
ハイオマーカ―探索
ヒット化合物改善設計
結晶構造精密化計算
大型計算機利用
タンパク質立体構造予測
タンパク質機能予測
タンパク質局在予測
タンパク質-DNAドッキング
タンパク質-リガンドドッキング
タンパク質間ドッキング
超分子立体構造モデリング
天然生理活性物質探索
天然変性タンパク質
天然変性部位予測
実験データと連携したシミュレーション
全原子分子動力学シミュレーション
大規模分子シミュレーション
分子動力学シミュレーション
Gタンパク質モデリング
量子化学計算

- BINDS は事業に参加する研究者が「外部研究者の皆様の研究が進むようにお手伝いする」事業です。
- 外部研究者は、原則として無償で支援を受けることができます。
- まずは、ワンストップ窓口からコンサルティングの申請を行ってください。申し込みは、non-confidential 情報で行っていただきます。コンサルティング開始以降は、ご相談内容、研究内容はご希望に応じて秘匿されます。
- BINDS の支援を受けられた成果は、原則として公開をお願いします。成果公開の時期についてはご相談ください。