

## 創薬支援研究におけるインシリコ技術の活用事例の紹介

国立研究開発法人 産業技術総合研究所  
創薬分子プロファイリング研究センター  
筑波大学医学医療系生命医科学域

広川貴次

急増するゲノム配列データとタンパク質立体構造解析技術の発展により、構造生物学データを起点とした創薬支援研究が本格的に促進されている。しかし、構造生物学データの中には、特定の条件や環境に依存した構造情報により、そのままのデータでは創薬へ適用が難しいものがある。インシリコ創薬の基盤技術である、分子モデリングや分子シミュレーションは、このような問題を補完できる技術であり、構造生物データと融合させることで、より高度な創薬支援研究が実現可能となる。発表では、**BINDS**での成果を中心に、ドッキング計算（タンパク質-タンパク質，タンパク質-低分子），分子動力学（MD）計算等の様々な分子シミュレーション要素技術を統合した戦略による、実用性を目指したインシリコ創薬の高度化研究と支援研究について紹介する。

創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム(BINDS): <https://www.binds.jp/>