



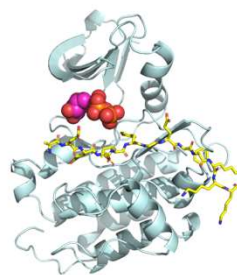
AI・シミュレーション を活用した先端構造ベース創薬



インシリコデザインプロジェクト
リーダー 李 秀栄

01 研究の背景・目的

本プロジェクトは、大量のデータからヒントを見つける情報学（インフォマティクス）の技術と、病気の原因となるタンパク質などが、薬の候補となる分子を「どうやって見つけ、結びつくか」を分子の形と動きから紐解く構造シミュレーション技術を融合させ、生命の基本的な仕組みの理解に基づいた、理にかなった創薬研究開発を推進します。所内、他機関、大学と連携し、低分子に留まらず、中・高分子といった多様なモダリティに対応した医薬品設計技術確立し、あらゆる創薬標的に対して、素早く正確に医薬品候補分子を創出することを目指します。



AIが生物学50年来の
未解決問題を克服

AlphaFold3で予測した
キナーゼとATP、
基質ペプチドの相互作用

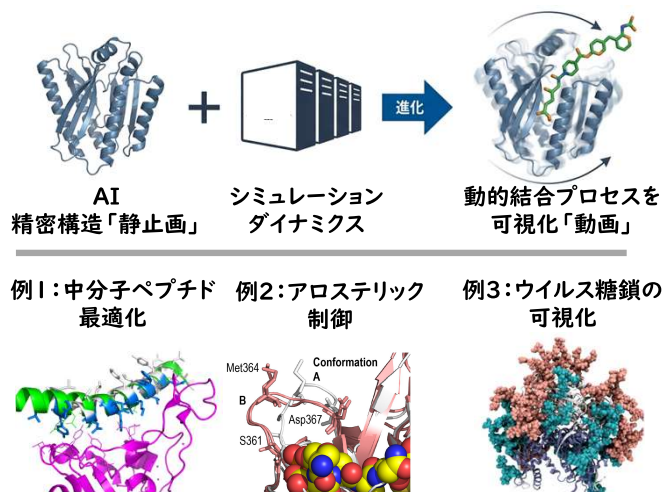
02 研究内容（特徴・独自性）

構造モデリング基盤の開発と創薬応用

薬の標的となる分子の「形」を利用した構造ベース創薬の開発研究を推進します。AIや分子シミュレーション技術を活用し、病気の原因となる分子同士が体内で「どのように結びつくか」という、複雑な動きを正確に可視化します。

特に、生命現象の本質である「動き（ダイナミクス）」を重視し、物理法則に基づいたシミュレーションを用いて、AIによる高精度な「静止画」に動きを吹き込み、高精度の「動画」へと進化させることで、実験では捉えきれない一瞬の結合プロセスを可視化します。「動き」を取り入れた精密な構造モデリング技術を開発することで、生命の仕組みを深く理解し、それに基づいた新しい薬づくりを実現することを目指します。

「分子の動き」を捉える次世代創薬



データ統合基盤の開発と創薬応用

ゲノムをはじめ生命科学の多様なデータを集めて解析するプラットフォームの研究開発を通じて、病気に関わる標的候補が体内でどのような「つながり（ネットワーク）」を持っているかを明らかにし、新しい薬づくりを大きく加速させることを目指します。

生命科学情報をシームレスに活用し創薬を加速



アピールポイント（期待される効果・応用）

- 実験では捉えきれない結合プロセスを可視化し、候補化合物の精密設計を可能にします。標的分子の構造情報が限られ、従来困難だった薬剤設計を現実的な選択肢として提示します。
- 低分子だけではなく、中・高分子医薬品など多様な標的に対する設計戦略を構築し、製薬企業との共同研究・技術移転を通じて、社会実装への道を切り開きたいと考えています。

関連する情報

〔論文〕

Hosoe Y, Miyanoiri Y, Re S et al. FEBS J, 2023, 290:2366–2378.
Re S, Mizuguchi K. J Phys Chem B 2021, 125:2089–2097.
Chen Y-A et al. Bioinformatics 2022, 38:4454–4456.

研究キーワード

構造シミュレーション、動的機能設計、
データウェアハウス

インシリコデザインプロジェクト

<https://www.nibn.go.jp/activities/In-silico-design.html>



是非、ご相談ください