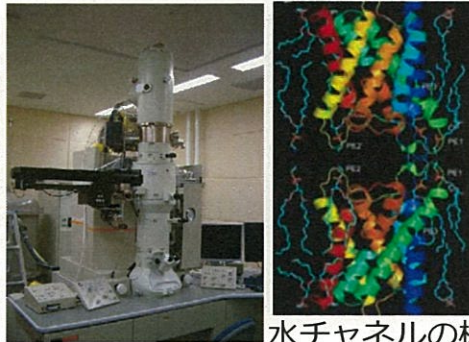


# ITを活用した革新的医薬品創出基盤技術開発

## ○プロジェクトの目的

ITを活用することで、個別化医療・先制医療のための創薬プロセスを合理化する革新的な創薬基盤ツールを開発し、創薬コストの低減をはかるとともに、新薬創出力の強化する。

X線及び電子線による蛋白質及びその化合物複合体の精緻立体構造取得技術



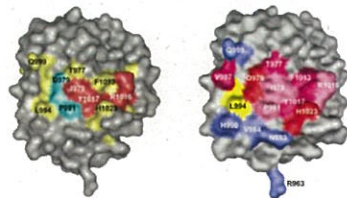
水チャネルの構造

電子顕微鏡を用いて創薬標的タンパク質の立体構造を明らかにする。

サンプルの調製技術

構造データ

核磁気共鳴法 (NMR)による蛋白質の生理的条件下における動的立体構造解析



NMRを用いて体内にあるときと近い状態の立体構造を明らかにする。

サンプルの調製技術

構造データ

シミュレーション結果

## 探索的実証研究

シミュレーションの結果、得られた化合物が実際に体の中で作用するか検証する。

細胞/動物内での効果検証



革新的in silicoシミュレーション/スクリーニングソフトウェアの開発



コンピューター内で、取得した立体構造と化合物の結合をシミュレーションする。

高精度・高速モデリング・分子間相互作用シミュレーションと評価用コンピュータシステム(上)と相互作用モデル(下)

相互作用データ

