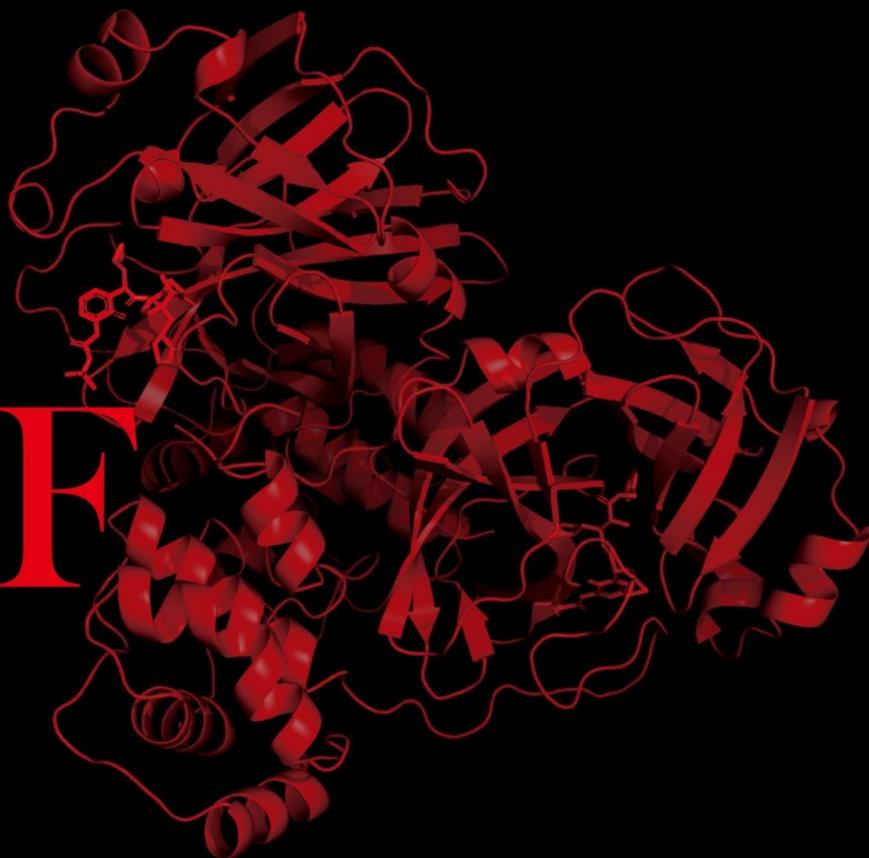


# 分子機能研究所

iM<sup>2</sup>F



GOOD IN SILICO DRUG DESIGN.

INSTITUTE OF  
MOLECULAR FUNCTION

資料

PAMPHLET



分子機能研究所創立21周年

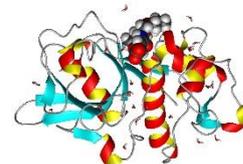
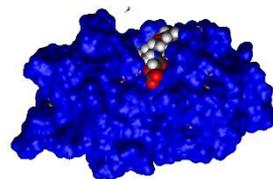
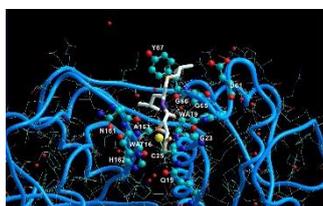
## 高度な創薬化学受託研究サービスを提供

2005年 国産初  
構造ベース創薬システム開発

- 生体高分子立体構造精密化
- ホモロジーモデリング
- リガンド結合部位予測
- ドッキングシミュレーション
- バーチャルスクリーニング
- 三次元化合物データベース構築
- 生体高分子量子化学計算

分子機能研究所は、2005年に、それまで確立した手順のなかったホモロジーモデリング過程を科学的根拠に基づいて世界で最初に標準化し、商用としては現在も国産唯一のホモロジーモデリングソフトを研究開発製品化、2006年に世界で初めて生体高分子側のインデュードフィット効果も取り扱え、かつ、試行化合物の電荷をコンフォメーション毎に任意半経験分子軌道法でアサインしながらドッキングできる商用としては現在も国産唯一のドッキングシミュレーションソフトを研究開発製品化している民間の研究機関です。

分子機能研究所設立以来、研究成果を具現化したソフトウェア開発・高度化と製品販売を主体に、独自の受託研究サービスも提供しています。2008年には分子機能研究所が提供した受託研究が Science 誌に受理されるなど、多くの実績を持ちます。



Science 319, 624–627, 2008.

分子機能研究所は長年の豊富な実験創薬化学を基盤としつつ、独自に必要な創薬支援技術を研究開発できる技術力があるため、他研究機関では取り扱い困難な難易度の高い研究にも対応可能です。

## インシリコ創薬コア技術

生体高分子システム立体構造からのリガンド結合部位予測、構造ベースファーマコフォア予測、生体高分子間相互作用部位予測に関する特許を取得しており、これら手法および構造ベースファーマコフォアとリガンドベースファーマコフォアとの重ね合わせによる高精度ドッキングシミュレーション、構造ベーススクリーニング、リガンドベーススクリーニング、構造ベースファーマコフォアを用いたデノボデザインなどの応用技術に関する権利を保有しています。

### MFDD インシリコ創薬受託研究サービス

アカデミック：10万円～  
一般：20万円～



生体高分子における相互作用部位の予測方法, JP2007-299125, 2006.

## サービス内容

MFDD インシリコ創薬受託研究サービスは、単純な受託計算ではなく、事前に検証や論文調査を行い、最先端の構造ベース創薬 (SBDD) やリガンドベース創薬 (LBDD)、次世代の量子化学創薬 (QMDD) などのインシリコ創薬技術を駆使して、お客様に最善の手法を提案します。

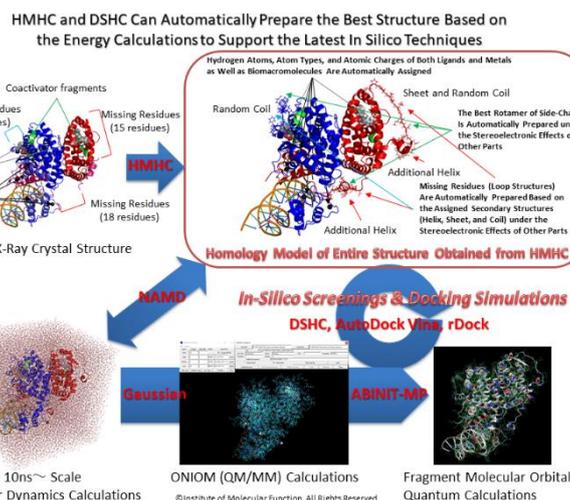
ホモロジー検索、アミノ酸配列アラインメント解析、ホモロジーモデリング、タンパク質二次構造予測、立体構造予測、生体高分子立体構造精密化、核酸 (DNA、RNA) モデリング、ペプチドモデリング、複雑な生体高分子システムモデリング、分子動力学計算、分子シミュレーション、リガンド結合部位予測、基質結合部位予測、相互作用部位予測、分子ドッキング、誘導適合効果 (インデューズドフィット) を考慮した生体高分子システム及びリガンドフレキシブルドッキング、タンパク質-リガンドドッキング、核酸-リガンドドッキング、タンパク質-タンパク質 (ペプチド) ドッキング、化合物ライブラリー構築、化合物データベース作成、三次元化合物ライブラリー構築、インシリコスクリーニング、バーチャルスクリーニング、精密ドッキングスタディー解析、構造ベースファーマコフォア予測、結合様式予測、生体分子及び低分子の量子化学計算、フラグメント分子軌道計算、全系量子化学計算、インターフラグメント相互作用解析、QM/MM 計算、ONIOM 計算、電子相関 MP2 レベルでの振動解析による結合自由エネルギー計算、リガンドベースファーマコフォア予測、ファーマコフォアモデリング、ファーマコフォアベースバーチャルスクリーニング、リガンドベースバーチャルスクリーニング、類似化合物検索、部分構造検索、類似構造探索、活性化化合物からの標的予測 (逆引き予測)、定量的構造活性相関解析、3D QSAR、ROC 分析、分子設計、ドラッグデザイン、リード最適化、遷移状態解析、NBO 解析、反応座標解析、合成ルート検索、合成ルートデザイン、生体分子ネットワーク・パスウェイ解析などを駆使して創薬化学研究の課題解決をトータルにサポートします。

## 対応可能技術

MFDD インシリコ創薬受託研究サービスでは、分子機能研究所が多数の論文調査などの事前調査・実施可能性可否の事前検証を行い、お客様に最善の手法を提案します。

対応可能技術 (一例)
ホモロジー検索、アミノ酸配列アラインメント解析、鑄型検索、ホモロジーモデリング (タンパク質、タンパク質-低分子複合体、タンパク質-タンパク質複合体、タンパク質-核酸複合体、等) (ホモロジーモデリングによる立体構造予測、ドラッグデザイン用精密モデリング、側鎖ロータマーモデリング、等)
タンパク質二次構造予測 (タンパク質)
立体構造予測、生体高分子システム立体構造精密化 (タンパク質、核酸、低分子、等)
核酸 (DNA、RNA) モデリング、ペプチドモデリング
複雑な生体高分子システムモデリング (タンパク質、核酸、低分子、金属原子、水分子等から成る複合体、等)
分子動力学計算 (シミュレーション) (タンパク質、核酸、低分子、等)
リガンド結合部位予測、基質結合部位予測、生体高分子間相互作用部位予測 (タンパク質、核酸、PIEFII 法)
精密ドッキング解析 (生体高分子システム-低分子、生体高分子システム-生体高分子、生体高分子システム-ペプチド、等) (インデューズドフィットを考慮した生体高分子システム及びリガンドフレキシブルドッキング)、結合様式予測
タンパク質-リガンドドッキング、核酸-リガンドドッキング
タンパク質-タンパク質 (ペプチド) ドッキング (タンパク質-タンパク質ドッキング、タンパク質-抗体ドッキング、タンパク質-ペプチドドッキング)
インシリコスクリーニング (構造ベーススクリーニング、バーチャルスクリーニング) (タンパク質-リガンドドッキング、核酸-リガンドドッキング、タンパク質-ペプチドドッキング、核酸-ペプチドドッキング、等)
類似化合物検索、部分構造検索、類似構造探索 (低分子)
ファーマコフォアモデリング、ファーマコフォアベースバーチャルスクリーニング、リガンドベーススクリーニング (低分子)
リガンドベースバーチャルスクリーニング (低分子)
活性化化合物からの標的予測 (逆引き予測) (化合物 → 標的タンパク質探索)
化合物ライブラリー構築、化合物データベース作成、三次元化合物ライブラリー構築 (低分子、等)
量子化学計算、フラグメント分子軌道法計算 (タンパク質-低分子、核酸-低分子、低分子、等)
QM/MM 計算、ONIOM 計算 (低分子、タンパク質-低分子、核酸-低分子、等)
生体分子との相互作用シミュレーション解析 (電子相関 MP2 レベルでの振動解析による結合自由エネルギー計算、インターフラグメント相互作用解析、等)、分子シミュレーション

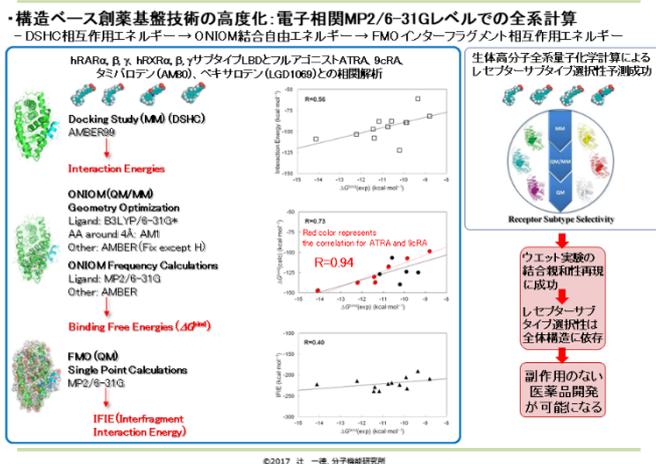
定量的構造活性相関解析、ROC 分析
遷移状態解析、NBO 解析（ナチュラル結合軌道解析）、反応座標解析
合成ルート検索、合成ルートデザイン（分子設計、合成経路設計、低分子、等）
ドラッグデザイン（リード最適化、等）
生体分子ネットワーク・パスウェイ解析（生体高分子、低分子、等）
その他（メカニズム解析、等）



構造ベース創薬 (SBDD) とリガンドベース創薬 (LBDD)、逆引き探索



生体高分子全系量子化学計算によるレセプターサブタイプ選択性予測



医薬品の開発には膨大な資金・時間・労力がかかります。分子機能研究所は創薬化学（探索）研究を高度化・効率化するための創薬化学基盤研究にウェットとインシリコの両面から長年取り組んでおり、MFDD インシリコ創薬受託研究サービスではこれまでに培ってきた構造ベース創薬（SBDD）やリガンドベース創薬（LBDD）などの創薬化学基盤技術に加え、分子機能研究所が牽引する次世代の量子化学創薬（QMDD）などの最先端創薬化学技術でお客様に最善の課題解決策を提案します。

過去の実施例

新型コロナウイルス構成タンパクや宿主細胞内経路タンパク、GPCR、イオンチャネル、トランスポーター、電子伝達系、光合成系などの膜貫通タンパク、核内受容体、各種受容体、PPI、輸送タンパク、抗原抗体、キナーゼ、プロテアーゼ、シンターゼなどの酵素、ペプチド医薬、DNA、RNAの核酸医薬、農薬、食品成分、化粧品材料等を標的とした多数の実績があります。

過去の実施例（一例）

- ねじれ結合 17 個からなる光学活性医薬候補化合物の精密ドッキング解析による最安定複合体構造予測
- 核内受容体を創薬ターゲットとしたリード探索と合成提案
- アポタンパク質を用いたインデュースドフィット効果を考慮した精密ドッキング解析
- 金属タンパク質のホモロジーモデリング、阻害剤との精密ドッキング解析、メカニズム解析
- ペプチドドッキングによる構造活性相関解析

抗原抗体ドッキングと最安定複合体構造に対する QM/MM (ONIOM) 構造最適化計算
DNA マイナーグループバインダーの精密ドッキング解析
6 サブユニットから成る超巨大膜貫通型領域を持ち、かつ、巨大膜外領域からなる超巨大タンパク複合体アポフォームのホモロジーモデリングおよび立体構造予測と誘導適合効果を考慮した阻害剤の高精度ドッキングによるスコアリングおよびドッキングポーズ解析
膜貫通型タンパク質複合体全体構造のホモロジーモデリングと膜外および膜内領域の立体構造予測と医薬候補化合物とのドッキングポーズ予測
DNA アプタマー (中分子) の精密ドッキング解析と QM/MM (ONIOM) 構造最適化計算
RNA アプタマーの精密ドッキング解析、QM/MM (ONIOM) 構造最適化計算、全系量子化学計算 (フラグメント分子軌道法) による構造活性相関解析
3500 残基からなる超巨大複合体構造のホモロジーモデリング、1ns 分子動力学シミュレーション、阻害剤結合サイト予測、医薬候補化合物の精密ドッキング解析と構造活性相関解析
輸送タンパクに対する 150 万化合物のインシリコスクリーニングと上位ヒット化合物に対する高信頼性ドッキングスクリーニングの組み合わせによるヒット絞り込み
糖尿病、肥満、抗炎症、アルツハイマー、がん等のアンメット・メディカルニーズに対するパスウェイ検索による創薬ターゲット選定、ホモロジーモデリング、バーチャルスクリーニング、精密ドッキング解析、ファーマコフォアスクリーニング、デノボデザイン、リード最適化、合成ルート提案
機能性材料の工業的合成ルートの設計：遷移状態解析による反応経路探索に基づく反応設計と触媒設計、反応メカニズムの提案
スーパーコンピュータを用いた 1 マイクロ秒スケールでの分子動力学シミュレーション解析
スーパーコンピュータを用いた約 20,000 原子からなるタンパク-核酸-リガンド-金属イオン複合体の MP2 理論レベルでの QM/MM (ONIOM) 構造最適化計算と振動解析による結合自由エネルギー計算及び MP2 理論レベルでの全系フラグメント分子軌道計算によるインターフラグメント相互作用解析 (約 1,200 フラグメント)
計算事例のない医歯薬化粧材料の性能・機能・効果に対する計算手法の提案と実施
ペプチドホルモンの標的探索 (逆引き探索) と候補ターゲット膜貫通タンパク質のホモロジーモデリング、タンパク-ペプチドドッキング解析
1 億化合物データベースを用いた類似構造検索、部分構造検索と合成ルートデザイン
RNA センサータンパク質-RNA 複合体の立体構造精密化とフラグメント分子軌道法によるインターフラグメント解析、及び、RNA 結合表面でのリガンド結合部位予測とドラッグリポジショニングの観点に基づくドラッグライブラリーを用いたインシリコスクリーニング
活性型の味覚・嗅覚センサー膜貫通タンパク質のホモロジーモデリングとリガンド結合部位予測、及び、食品成分のインシリコスクリーニング
ペプチドホルモン受容体の膜外領域活性コンフォメーションのホモロジーモデリング、リガンド結合部位予測、環状ペプチド化合物の精密ドッキング解析による構造活性相関解析、及び、活性候補化合物のデザインと合成ルートデザイン
活性及び不活性化化合物の分子重ね合わせ手法によるリガンドファーマコフォア予測とリガンドベースバーチャルスクリーニング
アロステリックサイト予測とアロステリックエフェクターのドッキング解析
分子動力学シミュレーションによる経年劣化シミュレーション
高精度ブラインドドッキング解析による PPI インターフェイスの構造ベースファーマコフォア (ホットスポット) 予測とペプチド及び生体高分子に置き換わる低分子阻害剤のスクリーニング

## 計算メニューの一例と価格表

料金は基本料金に個別計算料金が加算されます。

基本料金 (スポット契約の場合)	一般 200,000 円 (税別) アカデミック 100,000 円 (税別)	
計算メニュー (一例)	納期	スポット契約の料金 (税別)
<b>高速ドッキングスクリーニング (インシリコスクリーニング、バーチャルスクリーニング)</b> 生体高分子システムの Belly 計算、リガンドや阻害剤との複合体構造を用いる場合には再ドッキング検証を含む。 場合によりヒット化合物の Rule of 5 結果を提示		
100 万化合物以内 (1 化合物ライブラリ毎)	2 週間	一般 400,000 円 アカデミック 200,000 円
<b>高信頼性ドッキングスクリーニング (サイトドッキングとブラインドドッキングにも対応)</b> 生体高分子システムの Belly 計算、リガンドや阻害剤との複合体構造を用いる場合には再ドッキング検証を含む		
1,000 化合物以内 (1 化合物ライブラリ毎)	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円

<b>精密ドッキングスタディー解析・結合様式予測</b> （インデュースドフィット効果（誘導適合効果）を水素原子、側鎖、主鎖、部分構造や全体構造などの指定部分に適用可能） 最安定複合体構造のドッキングモード・ドッキングポーズ予測、相互作用解析、定量的構造活性相関に有効 生体高分子システムの Belly 計算、リガンドや阻害剤との複合体構造を用いる場合には再ドッキング検証を含む		
10 化合物以内（エナンチオマー、ジアステレオマーを含む） 生体高分子側 500 残基以下	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
10 化合物以内（エナンチオマー、ジアステレオマーを含む） 生体高分子側 1,000 残基以下	2 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
<b>タンパク質-タンパク質ドッキング解析</b> 生体高分子システムの Belly 計算を含む		
1,000 残基以下（合計残基数）	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
<b>ドッキング解析用 PDB 選定</b> 目視確認、残基数確認、構造未決定部分確認、ミューテーション確認		
100 PDB 以内（同種生体高分子毎）	1 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
<b>類似化合物探索、部分構造検索</b>		
500 万化合物以内（1 化合物ライブラリ毎）	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
<b>生体高分子システム立体構造精密化</b> （複合体モデリング、ドッキング解析、相互作用解析、結合様式予測用立体構造精密化） NMR や Cryo-EM 構造など分解能が低い場合、あるいは、複数ユニットから成る四次構造作成時に有効 ミッシング残基やミューテーションがある場合はホモロジーモデリングとの組み合わせが必要		
500 残基以下	1 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
1,000 残基以下	1 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
<b>リガンド結合部位予測、基質結合部位予測</b> リガンド結合部位や基質結合部位が不明な場合		
500 残基以下	1 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
1,000 残基以下	1 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
<b>スクリーニング用三次元化合物ライブラリ構築</b> pH に合わせてプロトン化状態を反映、通常は生理的条件下の pH=7.4 で準備		
100 万化合物（1 化合物平面構造データベース毎）	2 週間	一般 400,000 円 アカデミック 200,000 円
<b>ホモロジーモデリング</b> （ホモロジー検索、鋳型検索、アミノ酸配列アラインメント解析を含む） ドッキング解析用の構造に構造未決定領域や多数のミューテーションや非天然残基がある場合に構造補完として有効		
500 残基以下 鋳型配列同一性 40%以上	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
1,000 残基以下 鋳型配列同一性 40%以上	2 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
500 残基以下 鋳型配列同一性 40%未満	3 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
1,000 残基以下 鋳型配列同一性 40%未満	3 週間	一般 400,000 円 アカデミック 200,000 円
<b>分子動力学シミュレーション</b> （GPU 対応）		
500 残基以下 1ns	1 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円

500 残基以下 10ns	2 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
500 残基以下 100ns	2 週間	一般 400,000 円 アカデミック 200,000 円
1,000ns (1 マイクロ秒) 程度の分子動力学シミュレーション*	応相談	応相談
<b>QM/MM 構造最適化計算 (B3LYP/6-31G*:AM1:AMBER)</b> 全系量子化学計算用安定構造準備、量子化学計算レベルでの結合自由エネルギー計算用		
300 残基以下 QM 領域 10 残基以下、High Layer (低分子) 分子数 500 以下	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
上記条件を超える生体高分子システムの QM/MM 構造最適化計算*	応相談	応相談
<b>全系量子化学計算一点計算 (MP2/6-31G)</b>		
300 残基 (300 フラグメント) 以下 (金属タンパクを除く、基底関数に STO-3G や 3-21G を用いた場合でも周期表 Kr までの系)	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
上記条件を超える生体高分子システムの全系量子化学計算*	応相談	応相談
<b>ファーマコフォアモデリング、ファーマコフォアベースパーチャルスクリーニング (構造ベース、リガンドベース)</b>		
ファーマコフォアモデリング	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
ファーマコフォアモデリング用リガンド及びデコイ三次元構造準備 (100 化合物以内、10 コンフォメーション / 1 化合物)	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
ファーマコフォアベーススクリーニング 100 万コンフォメーション以内 (1 化合物につき 100 コンフォメーション処理する場合は 1 万化合物以内) (別途、スクリーニング用三次元化合物ライブラリ構築が必要)	2 週間	一般 300,000 円 アカデミック 150,000 円
<b>分子設計、ドラッグデザイン、リード最適化</b> 精密ドッキング解析などから候補となった骨格化合物について、合成ルートから原材料調査と反応条件検索を実施し、合成可否を判断して目的化合物をデザインします (デザインした化合物の標的との親和性については、別途に対応する個別計算を実施していただく必要があります) <b>目的活性及び合成達成を保証するものではありません</b>		
合成目的化合物の合成ルートの提示がある場合 1 骨格 20 化合物以内	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円
合成目的化合物の合成ルートの提示がない (合成ルートの調査が必要な) 場合 1 骨格 20 化合物以内	3 週間	一般 400,000 円 アカデミック 200,000 円
<b>詳細報告書等</b>	2 週間	一般 200,000 円 アカデミック 100,000 円

実際の受託研究サービスではお客様のご要望に合わせて、これら個別計算メニューの組み合わせで対応することになります。

納品物はお客様の使用環境に変換した結果データ類の電子媒体、簡易報告書、簡単な結果報告が基本となります。

詳細報告書が必要な場合は詳細報告書等オプションも選択して頂く必要があります。

\*スーパーコンピュータをご利用いただく必要があります。スーパーコンピュータの利用料金は別途、全額お客様ご負担となります。スーパーコンピュータでの商用ソフトウェアの使用料金は全額お客様のご負担となります。その他、スーパーコンピュータの使用にあたっては技術料等が別途に必要となります。詳しくはご相談ください。

## 最高品質の成果報告

受託研究内容にもよりますが、詳細報告書は、通算で数万報の論文を精読し、数十報の論文を執筆、20 年以上の国際査読誌論文レフェリー経験のある研究者が、そのまま論文として投稿可能な状態にまで短期間で仕上げ提出します。

## 継続的研究成果発表による信頼性

分子機能研究所が独自に研究している研究成果は継続して国際査読誌に受理されており、MFDD インシリコ創薬受託研究サービスの品質の信頼性に努めています。

受託研究結果を公開する場合、上記の研究成果も引用していただく必要があります。

## 圧倒的費用対効果

研究的価値が高ければ高いほど費用が膨らみますが、ご予算内で課題解決に努めますので、まずはご相談ください。アカデミックではさらにリーズナブルな費用で対応します。

受託研究期間終了後も査読論文受理や特許明細書出願まで徹底的にサポートを行っており、英文・和文に関係なく即日校正にも対応します。論文中の図表に必要な高品位図表作成等にも対応しています。

## 受託研究サービスの流れ

<b>お問い合わせ</b>
まずはお問い合わせフォームまたは電話にてご連絡ください。
▼
<b>秘密保持契約</b>
具体的な課題に対するヒアリング前に秘密保持契約をいたします。
▼
<b>ヒアリング</b>
日程調整を行い、現状の確認やお客様のご要望などをお伺いいたします。
▼
<b>研究業務仕様書・お見積り書提案</b>
ヒアリングした内容を元に通常 1～2 週間程度で文献調査、十分な事前検証を実施し、納期を含む研究業務仕様書とお見積り書をご提案させていただきます。
▼
<b>ご契約・発注</b>
発注に際して受託研究契約を取り交わせていただきます。本契約締結をもって正式発注とさせていただきますので、あわせて発注書をお送りください。
▼
<b>サービスのご提供</b>
研究業務仕様書に基づいて受託研究を実施いたします。 受託研究と同時に多数の文献調査を実施しますので、最善の手法をご提案させていただく場合があります。 お客様にご納得いただける場合は、追加費用のご負担なしに、納期までに変更研究を実施します。 なお、お客様より直接ご指示のあった追加研究に関しては新たなお見積りと納期変更が伴います。
▼
<b>納品・報告</b>
成果物に対して、ご確認いただきます。お客様で検収していただいたのちに、結果報告と質疑応答に対応いたします。瑕疵等が見つかった場合には修正を行い、納品いたします。
▼
<b>ご入金</b>
納品と同時に請求書を発行させていただきますので、通常は翌月末までに入金をお願いします。 翌月末締め、翌々月末入金にも対応いたします。分割でのお支払いなどにも対応しますのでご相談ください。

## 知的財産権

分子機能研究所の提供する MFDD インシリコ創薬受託研究サービスでは分子機能研究所が担当した部分に知的財産権が発生します。成果物の一部または全部を使用する場合、分子機能研究所を連名に入れていただく必要があります。連名にすることにより、学会や論文などの発表に必要なサポートが受けられます。

知的財産権を分子機能研究所が完全に放棄する必要がある場合は、学術利用と商用利用で条件が異なりますが、いずれの場合にも受託料金とは別途にロイヤリティーに関する契約を取り交わしていただきます。

## 受託研究結果の無保証

MFDD インシリコ創薬受託研究サービスでは、事前に十分な調査・検証を行い、お客様が納得されたのちに、受託研究契約を締結し、発注していただいています。逆に、ヒアリングや事前調査で明らかに技術範囲を超える課題については対応できない旨をお伝えすることがありますので、ご了承ください。

## 免責事項

MFDD インシリコ創薬受託研究サービスは学術研究であり、お客様にとって必要な結果を保証するものではありません。期待した結果が得られない可能性もある事をご理解の上、発注してください。

## 参考文献

- Microbiology Spectrum, 2024.  
Journal of Autoimmunity 139, 103085, 2023.  
Motonori Tsuji, Int. J. Mol. Sci. 23, 11009, 2022.  
PLOS ONE 16, e057705, 2021.  
Motonori Tsuji, FEBS Open Bio 10, 995-1004, 2020.  
Chem. Pharm. Bull. 68, 1193-1200, 2020.  
J. Virol. 94, e00252-20, 2020.  
J. Pharmacol. Exp. Ther. 372, 277-284, 2020.  
Motonori Tsuji, J. Comput. Aided Mol. Des. 31, 577-585, 2017.  
Motonori Tsuji, et.al., FEBS Open Bio 7, 391-396, 2017.  
Motonori Tsuji, J. Mol. Graph. Model. 62, 262-275, 2015.  
Motonori Tsuji, et. al., J. Comput. Aided Mol. Des. 29, 975-988, 2015.  
Motonori Tsuji, Asian J. Org. Chem. 4, 659-673, 2015.  
Motonori Tsuji, J. Struct. Biol. 185, 355-365, 2014.  
Plant Cell Physiol. 53, 1638-1647, 2012.  
Chem-Bio Informatics Journal 12, 1-3, 2012.  
Biochemistry 49, 10647-10655, 2010.  
Biochem. Biophys. Res. Commun. 395, 173-177, 2010.  
Science 319, 624-627, 2008.  
Motonori Tsuji, Mol. Sci. 1, NP004, 2007.  
Motonori Tsuji, J. Org. Chem. 69, 4063-4074, 2004.  
Motonori Tsuji, J. Org. Chem. 68, 9589-9597, 2003.

同意書にサインした博士号取得者（企業研究者、海外留学生、博士課程学生） 複数。  
技術サポートした招待講演、国際シンポジウム発表、国際学会発表、国内学会発表、特許明細書出願 多数。

## 2000年以前の医薬化学・生物有機化学・精密有機合成化学関連文献

- Motonori Tsuji, et.al., Biol. Pharm. Bull. 23, 513-516, 2000.  
Chem. Pharm. Bull. 47, 1778-1786, 1999.  
Chem. Pharm. Bull. 47, 699-701, 1999.  
Chem. Pharm. Bull. 47, 398-404, 1999.  
Biol. Pharm. Bull. 21, 544-546, 1998.  
Motonori Tsuji, et.al., Tetrahedron Lett. 39, 403-406, 1998.  
Chem. Pharm. Bull. 45, 1805-1813, 1997.  
Motonori Tsuji, et.al., Tetrahedron Lett. 38, 6693-6696, 1997.  
Tetrahedron Lett. 37, 2609-2612, 1996.  
Chem. Pharm. Bull. 44, 296-306, 1996.  
Motonori Tsuji, et.al., Biosci. Biotech. Biochem. 56, 778-782, 1992.

## お問い合わせ先

### 分子機能研究所

1986年から1992年に九州大学大学院農学研究科農芸化学農業薬剤化学江藤守総研究室（1994年アメリカ化学会農業研究国際賞受賞、2004年瑞宝中綬章叙勲受賞）とその流れを汲む大学での遷移状態アナログ薬剤の合成・生物活性と分子設計研究から始まり、1992年から2001年まで東京大学大学院薬学系研究科薬化学首藤紘一研究室（2005年タミバロテン承認、2010年瑞宝中綬章叙勲受賞）で実験創薬化学、特に、レチノイド化学を展開、1998年からポストゲノム創薬を先導する「コンピュータ分子設計法の高度化とその有効性の実験的検証研究」に関する国家プロジェクト（東京大学分子細胞生物学研究所）に参画、1980年代からコンピュータ薬物分子設計（CADD）システムの研究分野を牽引してきた東京大学薬学部医薬分子設計学研究室、東京大学発ベンチャー株式会社医薬分子設計研究所から2003年に独立。2005年にそれまで確立した手順のなかったホモロジーモデリング過程を科学的根拠に基づいて世界で最初に標準化した国産初のホモロジーモデリングソフトを研究開発製品化、商用としては現在も国産唯一のホモロジーモデリングソフト。2006年には世界で初めて生体高分子側のインデュースドフィット効果も取り扱え、かつ、試行化合物の電荷をコンフォメーション毎に任意半経験分子軌道法でアサインしながらドッキングできる商用としては現在も国産唯一のドッキングシミュレーション、バーチャルスクリーニングソフトを研究開発製品化している民間の研究機関。

TEL: 048-956-6985 Email: [sales@molfuction.com](mailto:sales@molfuction.com) URL: <https://www.molfuction.com/jp/>

2024年6月