

ケミカルバイオロジー & IT 創薬 (広川 貴次)

Chemical biology and In silico drug design (HIROKAWA Takatsugu)



HIROKAWA Takatsugu, Ph.D.
 Professor
 Chemical biology and In silico drug design,
 Division of Biomedical Science, Faculty of Medicine,
 University of Tsukuba



E-mail address: t-hirokawa@md.tsukuba.ac.jp
 URL: http://www.md.tsukuba.ac.jp/tmrc/research_lab/informatics/

分子シミュレーションと情報科学に基づくインシリコ創薬支援

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注目されています。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とされています。計算機を活用したインシリコ技術は、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ります。研究室では、創薬標的タンパク質を中心に、分子モデリング、分子シミュレーション、ケモインフォマティクス、ケミカルバイオロジーの要素技術に基づいた、実用性の高いインシリコ創薬の支援研究と高度化研究を行い、構造生物学データと創薬研究の橋渡しを目指します。

In silico Drug Design using Molecular Simulation and Informatics

Introduction of your research in English (Arial 10pt), 5-9 lines

With the development of increasing number of genome sequence data and protein structure determination, pharmacological and drug discovery research based on the structural biology data have been accelerated. However, some of experimental structural data may be inconvenient to use for drug discovery due to the constraints on crystallization conditions or undesirable biological state. Molecular modeling and simulation can help to bridge the gap between original state of experimental structural data and drug discovery oriented structural models. Structural models from the collaboration between the experimental data and in silico technology will be useful to guide sophisticated drug discovery process. We propose the supporting and developing of in silico drug discovery using molecular modeling and simulation based on fundamental technologies such as homology modeling, docking simulation, molecular dynamics (MD) simulation, chemical biology and cheminformatics.

Role of *in silico* analysis for drug discovery

