



# AMED/BINDS 連携セミナー

## 2019/10/9 Wed.

### 13:30 ~ 17:00

13:00 より受付開始

**会場：名古屋大学東山キャンパス**  
アジア法交流館 2階  
アジアコミュニティフォーラム  
(〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)

**参加費  
無料**

**定員：100名**

**事前登録：要**

※参加登録方法については BINDS の HP(<https://www.binds.jp/>) をご覧ください。

## 【AMED/BINDS 連携セミナー概要】

国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) の創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業 (BINDS) は、研究基盤・技術を整備して供用することにより、創薬やライフサイエンス研究の推進することを目的として、研究者の研究支援を行っています。事業開始から2年あまりの間に、支援総数は1500件を超えました。この BINDS 活用をさらに進めていただくために、BINDS のケミカルシーズ・リード探索ユニット、構造解析ユニット、インシリコユニット、プラットフォーム機能最適化ユニットが支援に提供している技術の紹介を行うユニット連携セミナーを開催します。セミナー終了後には、アカデミア創薬に関する個別相談会を行いますので、演者や AMED 職員に相談したいことがある先生方は、こちらも是非活用してください。

## 【講演者】

- 善光龍哉 (AMED 創薬戦略部医薬品研究課 調査役：AMED-PO)
- 安田公助 (東京大学創薬機構構造展開ユニット 特任准教授：ケミカルシーズ・リード探索ユニット)
- 金光佳世子 (東京大学創薬機構構造展開ユニット 特任講師：ケミカルシーズ・リード探索ユニット)
- 大嶋篤典 (名古屋大学細胞生理学センター 教授：構造解析ユニット)
- 白井剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授：プラットフォーム機能最適化ユニット)
- 金谷重彦 (奈良先端科学技術大学院大学 教授：インシリコユニット)
- 横島聡 (名古屋大学大学院創薬科学研究科 教授：ケミカルシーズ・リード探索ユニット)

BINDS HP はこちら



<https://www.binds.jp/>

## 【世話人】

- 横島聡 (名古屋大学大学院創薬科学研究科 教授)
- 白井剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授)

お問い合わせ先

国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 (AMED) 創薬戦略部 医薬品研究課  
〒100-0004 東京都千代田区大手町 1-7-1 読売新聞ビル 22階  
TEL : 03-5870-2219 FAX : 03-6870-2244  
E-Mail : 20-DDLSG-16@amed.go.jp URL : <https://www.amed.go.jp/>

13:00 — 受付

13:30 — 14:00 ■善光 龍哉 (AMED 創薬戦略部医薬品研究課 調査役 (AMED-PO))

## 「オールジャパンでの医薬品創出プロジェクトにおける AMED の取り組みと BINDS 事業」

国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 (AMED) の創薬戦略部は「オールジャパンでの医薬品創出プロジェクト (AJ-PJ)」を推進しています。この中で、アカデミアを中心とする研究者の研究を支援するのが「創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業 (BINDS)」です。

本講演では、AJ-PJ の全体像と主要プログラム、BINDS 事業概要を説明します。また BINDS の活用を推進するために、研究者がコンサルティングや支援の依頼を行うためのワンストップ窓口の入力方法などを紹介します。

14:00 — 14:45 ■安田公助 (東京大学創薬機構構造展開ユニット 特任准教授:ケミカルシーズ・リード探索ユニット) ■金光佳世子 (東京大学創薬機構構造展開ユニット 特任講師:ケミカルシーズ・リード探索ユニット)

## 「アカデミア創薬の想いをカタチに」

東京大学創薬機構構造展開ユニットは、製薬企業における創薬研究のエキスパートが有する実践創薬ナレッジと東京大学化合物ライブラリー等の創薬資源を最大限に活用し、独自のシーズを持つ研究者 (支援依頼者) と力を合わせて「アカデミア創薬の想いをカタチに」します。

①ヒット化合物からの創薬の方向性を探るコンサルティング ②ヒット周辺の構造活性相関の把握 ③薬理活性だけでなく薬物動態、物性、特許性を考慮した構造展開 などを通じて、病態モデル動物で有効性を示すリード化合物を目指します。

本講演では、構造展開ユニットの支援内容について説明させていただきます。

14:45 — 15:15 ■大嶋篤典 (名古屋大学細胞生理学センター 教授:構造解析ユニット)

## 「名古屋大学タンパク質生産領域の支援技術紹介」

本課題では膜タンパク質複合体に焦点を当て、クライオ電子顕微鏡による高分解能構造解析に至るための技術支援と高度化を行っています。具体的には膜タンパク質複合体の発現から精製、クライオ電子顕微鏡用試料調製、データ収集と画像解析までの各ステップの結果を相互にフィードバックさせながら、特に膜タンパク質複合体の生産とクライオ電子顕微鏡用試料調製に注力しています。今回は名古屋大学で行っている BINDS 事業の概要を紹介します。

15:15 — 15:30 休憩

15:30 — 16:00 ■白井剛 (長浜バイオ大学バイオサイエンス学部 教授:プラットフォーム機能最適化ユニット)

## 「Drug Target Excavator (DTX) による疾患 - ドラッグネットワークの解析」

プラットフォーム機能最適化ユニットでは創薬支援データベース VaProS-BINDS の高度化を行っています。VaProS-BINDS の新機能として、レセプト (薬価・処方数) や副作用の情報をドラッグに付与し、さらに疾患 - 疾患関連タンパク質 - ドラッグターゲット - 承認薬の関係をグラフとして解析する Drug Target eXcavator (DTX) を開発しました。このセミナーでは、DTX の疾患 - ドラッグネットワークの解析の結果を、創薬にどのように寄与できるかという観点から紹介します。

16:00 — 16:30 ■金谷重彦 (奈良先端科学技術大学院大学 教授:インシリコユニット)

## 「生薬データベースの高度化と構造創薬への応用:二次代謝物のデータサイエンス」

生薬データベースの高度化と構造創薬のインフォマティクス・プラットフォームの構築を目標に、薬用・植物知識ベース (機能性、配合)、さらにヒト生理活性を統合的に扱うデータベース KNApSAcK Family DB ([http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK\\_Family/](http://kanaya.naist.jp/KNApSAcK_Family/)) の構築を進めています。KNApSAcK Core System には、現在までに、114,238 レコードの生物種 - 二次代謝物の関係、二次代謝物の総数は 51,086 種となっています。また、KNApSAcK DB における代謝物と生物種の関係データベースを中心に、二次代謝物合成データベース CobWeb (<http://kanaya.naist.jp/CobWeb/top.jsp>) を構築しました。本講演では、これらのデータベースを活用した化学構造によるアルカロイド生合成経路における開始物質の予測について紹介します。

16:30 — 17:00 ■横島聡 (名古屋大学大学院創薬科学研究科 教授:ケミカルシーズ・リード探索ユニット)

## 「有機合成が支えるヒット化合物の構造展開と標的分子固定」

化合物ライブラリーのスクリーニングにより得られるヒット化合物は必ずしもベストではなく、構造展開を通して、薬理活性、代謝安定性、毒性、体内動態についてバランスのよい化合物へと仕上げていく必要があります。生体内標的の構造情報は、構造展開の強い武器になります。そのため標的分子が不明の場合、標的分子固定を進めることは有効な手段です。本セミナーでは有機合成が支える構造展開と標的分子固定の実例について紹介します。

17:00 — アカデミア創薬 個別相談会