分子機能研究所

iMF

GOOD IN SILICO DRUG DESIGN.

INSTITUTE OF MOLECULAR FUNCTION

資料

PAMPHLET

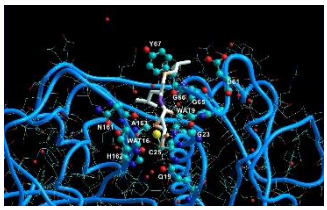
分子機能研究所　MFDD インシリコ創薬受託研究サービス

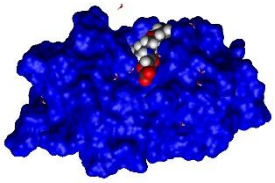
Molecular Function Drug Design and Discovery (MFDD)

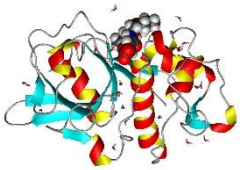
高度な創薬化学受託研究サービスを提供

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し、2006 年に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エア開発・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。

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

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

サービス内容

MFDD（Molecular Function Drug Design and Discovery）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）、高品質な AI 創薬のための次世代創薬化学技術の量子化学創薬（QMDD）などのコンピュータ支援創薬（CADD）技術・インシリコ創薬技術を駆使して、お客様に費用対効果の優れたオーダーメイドの学術研究を提供します。

対応可能技術

MFDD インシリコ創薬受託研究サービスでは、以下のような対応可能技術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。

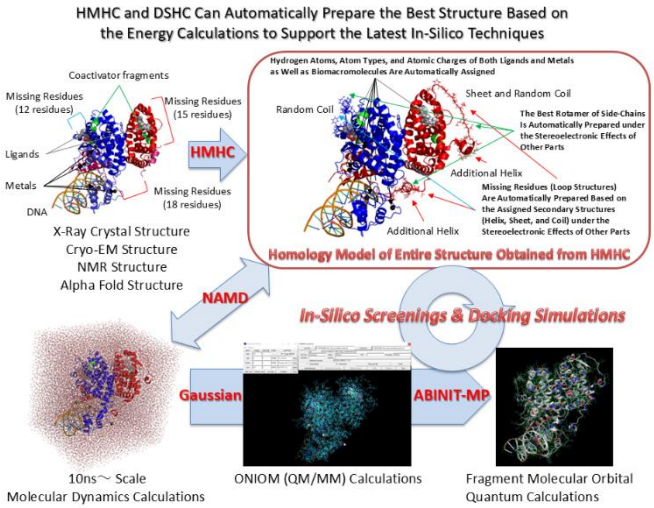
対応可能技術（一例）
ホモロジー検索、アミノ酸配列アラインメント解析、鋳型検索、ホモロジーモデリング（タンパク質、タンパク質－低分子複合体、タンパク質－タンパク質複合体、タンパク質－核酸複合体、等）（ホモロジーモデリングによる立体構造予測、ドラッグデザイン用精密モデリング、側鎖ロータマーモデリング、等）
タンパク質二次構造予測（タンパク質）
立体構造予測、生体高分子システム立体構造精密化（タンパク質、核酸、低分子、等）
核酸（DNA、RNA）モデリング、ペプチドモデリング
複雑な生体高分子システムモデリング（タンパク質、核酸、低分子、金属原子、水分子等から成る複合体、等）
分子動力学計算（分子動力学シミュレーション）（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）
精密ドッキングスタディー解析（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）（インデュース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も可能）、**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（タンパクータンパクドッキング、タンパクー抗体ドッキング、タンパクーペプチドドッキング）
インシリコスクリーニング、バーチャルスクリーニング（構造ベーススクリーニング）（タンパク－リガンドドッキング、核酸－リガンドドッキング、タンパク－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）
生体高分子の量子化学計算、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非経験的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、逆合成による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）
メカニズム解析、その他

分子機能研究所の各対応可能技術の独自アルゴリズムに関してはオフィシャルサイトのリンクをクリックして確認いただけます。

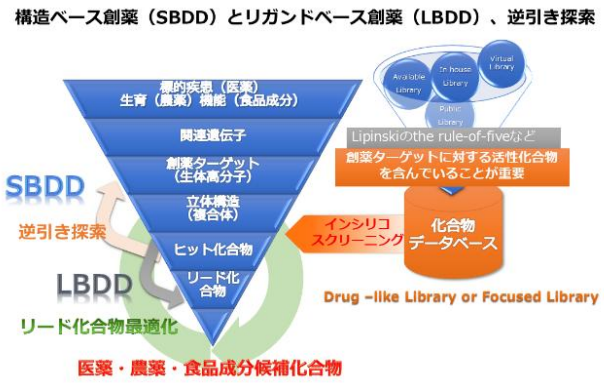
© 2003-2025 Institute of Molecular Function

分子機能研究所　MFDD インシリコ創薬受託研究サービス

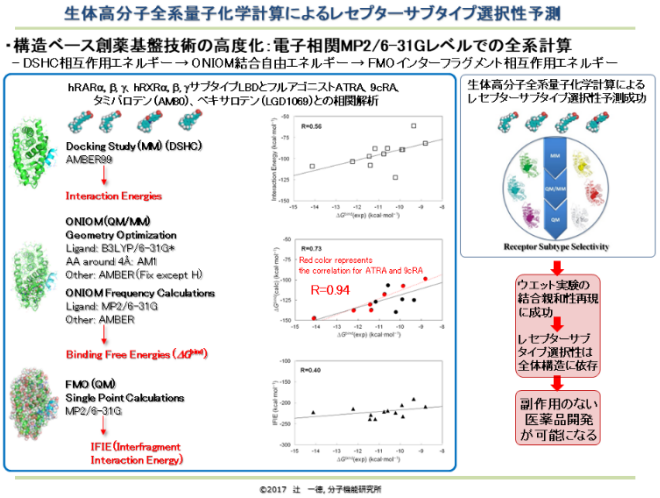
分子機能研究所の創薬化学研究ミッション



分子機能研究所の最先端 SBDD 技術



分子機能研究所の SBDD 技術と LBDD 技術のフロー



量子化学計算による生体高分子のシミュレーション・解析

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基盤研究にウエットとインシリコの両面から長年取り組んでおり、ドラッグリポジショニングやドラッグリユージングの戦略によるドラッグラグやドラッグロスの課題解決に取り組んでいます。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、分子機能研究所が提唱する次世代創薬化学技術の量子化学創薬（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。分子機能研究所では量子化学計算による QMDD 技術の開発を 2003 年の創設当時から進めており、現在主流の古典的分子力学計算では解決不可能な課題、特に、副作用を抑制するための受容体サブタイプ選択性問題に長年取り組んでおり、非経験的結合自由エネルギーなどの生体高分子システム全体を対象とする大規模量子化学計算に関する複数の成功事例を論文発表しています。QMDD 技術を普及させることで、AI 創薬が今後ますます高精度化することが期待されます。

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

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

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 マイナーグルーブ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ー核酸ーリガンドー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相互作用解析、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とフラグメント分子軌道法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
心毒性（hERG）と作用分離したイオンチャンネルアンタゴニストの精密ドッキングスタディー解析による構造活性相関解析と逆合成解析による目的受容体選択的アンタゴニストの分子設計
約 1 万残基数の 50 サブユニットから成る超巨大複合体の立体構造調整と精密ドッキングスタディー解析による構造活性相関解析とメカニズム解析
イオンチャンネルタンパク質における共有結合性リガンドの精密ドッキングスタディー解析と安定複合体構造のフロンティア軌道理論による HOMO-LUMO エネルギー解析による軌道相互作用理論による構造活性相関解析と活性予測、及び、目的活性化合物の分子設計

計算メニューの一例と価格表・納期

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）**
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） 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 結果や PAINS 結果を提示		

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

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**
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） 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**
精密ドッキングスタディー解析・結合様式予測（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**
タンパク質－タンパク質ドッキング解析 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**
ドッキング解析用 PDB 選定（通常は PDB 選定作業はサービスとしています） メジャーなタンパク質では数百単位の PDB が登録されている場合があり、その中から論文受理に必要な根拠もって適切な PDB を選定してほしいというご依頼があります 特にドッキング解析では PDB の選定作業が結果に左右することがあります 目視確認、残基数確認、構造未決定部分確認、ミューテーション情報確認、文献確認を行い、根拠を添えて最善の PDB を選定します		
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**
類似化合物探索、部分構造検索		
1,000 万化合物以内（1 化合物ライブラリ毎）	**1 週間**	**一般　200,000 円** **アカデミック　100,000 円**
生体高分子システム立体構造精密化（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**
リガンド結合部位予測、基質結合部位予測 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**
スクリーニング用三次元化合物ライブラリ構築 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**
ホモロジーモデリング（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、AlphaFold による予測構造を利用できない場合に有効		
500 残基以下　鋳型配列同一性　40%以上	**1 週間**	**一般　200,000 円** **アカデミック　100,000 円**

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

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	**2 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**
分子動力学シミュレーション（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**
QM/MM 構造最適化計算（B3LYP/6-31G*:AM1:AMBER） 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）　分子量 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**
全系量子化学計算一点計算（MP2/6-31G)		
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**
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（構造ベース、リガンドベース）		
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**
分子設計、ドラッグデザイン、リード最適化 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）**目的活性及び合成達成を保証するものではありません**		
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**
詳細報告書等	**2 週間**	**一般　200,000 円** **アカデミック　100,000 円**
創薬戦略コンサルタント	**応相談**	**一般　従量制課金制** **アカデミック　従量制課金制**

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エ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になります。詳しくはご相談ください。

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

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博士研究者が、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て提出します。

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

お問い合わせ
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。
▼
秘密保持契約
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。
▼
ヒアリング
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。
▼
研究計画書・お見積書提案
ヒアリングした内容をもとに通常 1～2 週間程度で文献調査、十分な事前検証を実施し、納期を含む研究計画書とお見積書をご提案させていただきます。
▼
ご契約・発注
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。
▼
サービスのご提供
研究計画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。
▼
納品・報告
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。
▼
ご入金
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。

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

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で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のある場合は、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

投稿中原稿
Biochemistry and Biophysics Reports 42, 101981, 2025
Journal of Clinical Investigation, 2025.
Int. J. Mol. Sci. 25, 13496, 2024.
Microbiology Spectrum 12, 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・理論有機化学関連文献

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薬研究国際賞受賞、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。ドラッグリポジショニングやドラッグリユージングの戦略により、ドラッグラグやドラッグロスの課題解決に取り組んでいる。副作用を抑制するための受容体サブタイプ選択性問題に次世代インシリコ創薬技術である量子化学創薬（QMDD）技術を提唱、開発を進めている。

© 2003-2025 Institute of Molecular Function

分子機能研究所　MFDD インシリコ創薬受託研究サービス

機関名　分子機能研究所（英語表記：Institute of Molecular Function, MolFunction, MolFunc, MF, iMF）　URL: https://www.molfunction.com/jp/

所在地　埼玉県三郷市高州 2-105-14　TEL: 048-956-6985　FAX:048-956-6985

代表　辻　一徳（ツジ　モトノリ）　博士（薬学）　東京大学
1997 年東京大学大学院薬学系研究科・薬学部教務補佐員、1998 年東京大学大学院薬学系研究科博士研究員、1998 年東京大学分子細胞生物学研究所研究員、1998 年医薬品副作用被害救済・研究振興調査機構基礎的研究業務派遣研究員、2001 年株式会社医薬分子設計研究所創薬研究部テーマリーダー研究員、2003 年（至現在）分子機能研究所代表、2007 年千葉大学大学院医学研究院招聘研究員兼任、2017 年（2025 年 3 月迄）東京医科歯科大学・東京科学大学非常勤講師兼任、2021 年（至現在）横浜国立大学非常勤教員兼任、2024 年（至現在）大阪大学招聘教員兼任

設立日　2003 年 7 月 1 日

事業内容　創薬化学研究、構造ベース創薬システム研究開発・販売、インシリコ創薬受託研究・コンサルティング、受託計算化学、創薬化学分野の人材育成事業

主要取引先
米 Hypercube 社
三菱 UFJ 銀行
朝日信用金庫
SMBC 信託銀行
デル・テクノロジーズ株式会社

協力会社
米 Gaussian 社

主要共同研究先
ケムフィズ社
東京医科歯科大学・東京科学大学
大阪大学
京都府立医科大学
横浜国立大学
お茶の水女子大学
昭和大学

協力研究機関
立教大学、東京工業大学・東京科学大学、米イリノイ大学、米スクリプス研究所

構造ベース創薬システム導入実績・インシリコ創薬受託研究サービス実績

製品（DSHC、HMHC）導入実績
大学：愛知県立大学、岩手医科大学、愛媛大学、岡山大学、岡山理科大学、大阪大学、お茶の水女子大学、九州大学、京都大学、近畿大学、熊本県立大学、熊本高等専門学校、慶應義塾大学、静岡大学、創価大学、千葉大学、筑波大学、東海大学、東京大学、東京家政学院大学、東京農工大学、東京理科大学、東京薬科大学、獨協医科大学、長崎国際大学、奈良県立医科大学、新潟大学、広島大学、北陸大学、北海道大学、前橋工科大学、宮崎大学、武庫川女子大学、山口県立大学、横浜国立大学、Skagit Valley College、The University of Bradford、University of South Carolina
国立・独立行政法人：産業技術総合研究所、千葉県がんセンター、日本原子力研究開発機構、理化学研究所
民間：多数

受託研究（MFDD インシリコ創薬受託研究）実績
大学：大阪大学、大阪工業大学、金沢工業大学、関西医科大学、京都大学、甲南大学、修文大学、帝京大学、電気通信大学、東京医科歯科大学、東京医科大学、東京大学、東京農工大学、東京理科大学、名古屋大学、日本大学、兵庫県立大学、弘前大学、北海道大学、北海道科学大学、名城大学
国立・独立行政法人：国立医薬品食品衛生研究所、日本医療研究開発機構、量子科学技術研究開発機構
民間：多数

共同研究実績
大学：大阪大学産業科学研究所、大阪大学蛋白質研究所、大阪大学微生物病研究所、お茶の水女子大学、神奈川歯科大学、北里大学、京都府立医科大学、金城学院大学、甲南大学、埼玉医科大学、自治医科大学、修文大学、千葉大学、東京医科歯科大学・東京科学大学生体材料工学研究所、東京医科歯科大学医学部、東京医科歯科大学大学院医歯学、東京医科大学、東京工業大学・東京科学大学、東京大学、東京農工大学、富山県立大学、兵庫県立大学、弘前大学大学院医学、横浜国立大学、University of Minnesota
国立・独立行政法人：乙卯研究所、国立医薬品食品衛生研究所、国立感染症研究所、東京都健康長寿医療センター、日本医薬情報センター、理化学研究所
民間：多数

営業時間
電話でのお問い合わせ：平日 9:00～20:00、土曜日 9:00～13:00（至急と判断される場合は 365 日 24 時間体制で対応）
作業時間：365 日 24 時間（年中無休）

アクセス
最寄駅（東京都内から）：　JR 常磐線各停　金町駅（東京都）　マイスカイ交通　高州地区文化センター入口　徒歩 3 分
千葉方面から：　京成金町線　京成金町駅（東京都）　マイスカイ交通　高州地区文化センター入口
茨城方面から：　つくばエクスプレス　三郷中央駅（埼玉県）　マイスカイ交通　高州地区文化センター入口
埼玉方面から：　JR 武蔵野線　三郷駅（埼玉県）　マイスカイ交通　高州地区文化センター入口

TEL: 048-956-6985　Email: sales@molfunction.com **URL: https://www.molfunction.com/jp/**

2025 年 7 月

© 2003-2025 Institute of Molecular Function