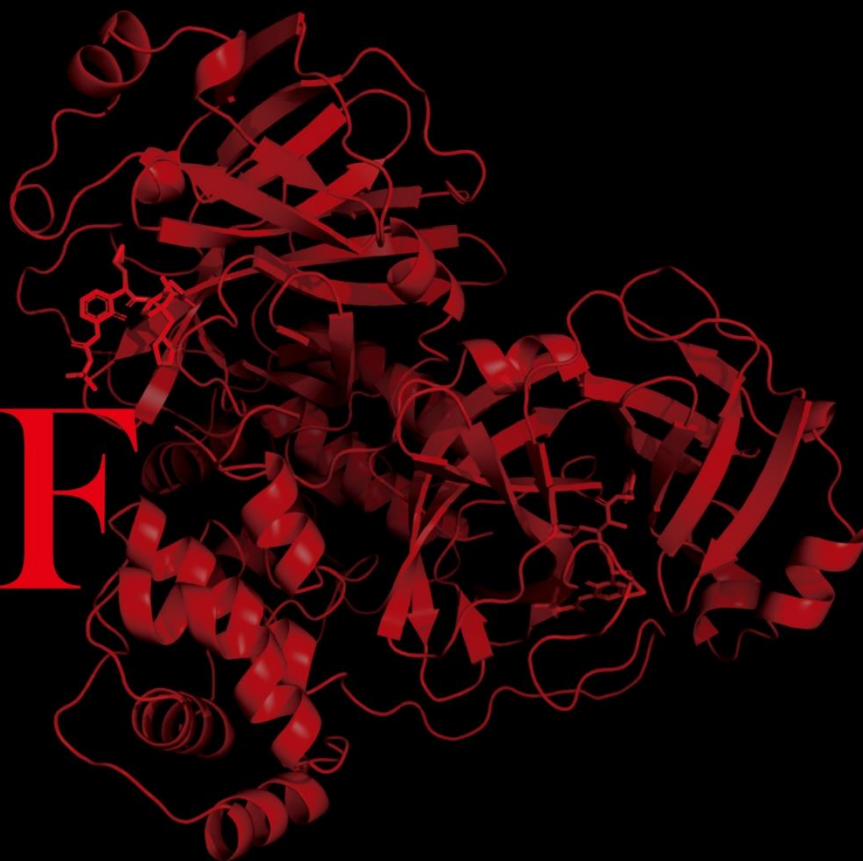


# 分子機能研究所

iM<sup>2</sup>F



GOOD IN SILICO DRUG DESIGN.

INSTITUTE OF  
MOLECULAR FUNCTION

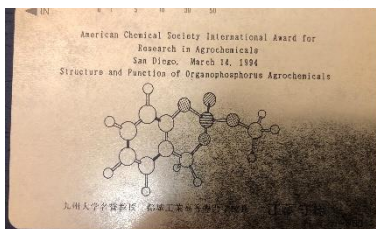
概要

PAMPHLET

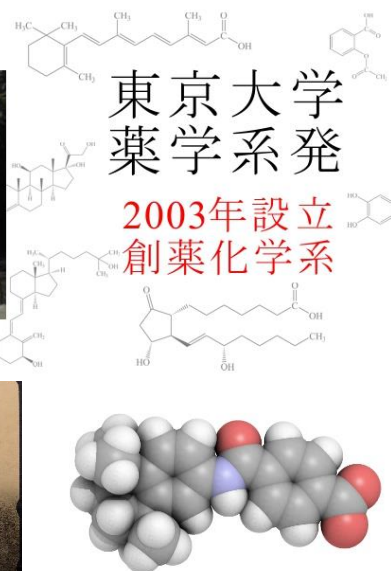


分子機能研究所は、1986年から1992年に九州大学大学院農学研究科農芸化学農業薬剤化学江藤守総研究室（1994年アメリカ化学会農業研究国際賞受賞、2004年瑞宝中級章叙勲受賞）と

その流れを汲む大学での遷移状態アナログ薬剤や生物制御化合物の合成・生物活性と分子設計研究、特に、植物発芽生長開花と昆虫変態に関する細胞組織の分化・増殖・恒常性にかかわる受容体発見を目指した有機合成化学を基盤とする研究から始まり、1992年から2001年までは東京大学大学院薬学系研究科薬化学首藤紘一研究室（2005年タミバロデン承認、2010年瑞宝中級章叙勲受賞）で有機合成化学を基盤とした動物の発生・分化・増殖・恒常性にかかわるレチノイン酸受容体を主とする核内受容体を標的とした実験創薬化学、特に、レチノイド化学を展開し、1998年からは東京大学分子細胞生物学研究所での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（医薬品副作用被害救済・研究振興調査機構）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年に独立し、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2005年に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）、また、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ソフト、及び、これをクラスター化した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。インシリコ創薬、特に構造ベース創薬で画期的生物制御化合物（発生と細胞組織の分化・増殖を高度に制御するミラクルドラッグ）発見を目指しています。創薬基盤技術の更なる高度化と国内外オープンソースプログラムや商用プログラムを統合した革新的インシリコ創薬システム開発、及び、国内外研究機関との受託研究や共同研究で豊富な実績があります。加えて、新規生物活性化合物（医薬品）や分子標的発見、基盤である基礎有機化学（理論有機化学）では計算化学を駆使して医薬品を目的通りに合成するための立体選択性起源の統一理論完成やビルディングブロックとしてのカルボラン化学、カルボラン生物活性化合物分野のパイオニアとしての実験創薬化学の長年の豊富な実績もあります。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も取り組んでいます。副作用を抑制する目的で受容体サブタイプ選択性問題に取り組んでおり、次世代インシリコ創薬技術である量子化学創薬技術（QMDD）の開発を進めており、複数の成功事例を論文発表しています。今後AI創薬に替わる次世代の創薬化学技術として注目されることが期待されます。新型コロナウイルス（COVID-19）治療薬研究では世界初の大規模インシリコスクリーニングを実施し、SARS-CoV-2複製増殖抑制や感染予防に関する研究成果を国内外にいち早く発信しています。分子機能研究所は、研究と教育を主な事業内容とし、創薬基盤技術の高度化と実験的検証研究を推進し、科学技術振興と社会貢献の観点から営利を第一目的とせず、創薬化学分野の人材育成を目的とする事業を展開しています。



サリチオン（アセチルコリンエステラーゼ阻害剤、有機リン系殺虫剤、遷移状態アナログ）

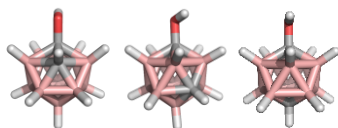


タミバロデン（AM80：レチノイン酸レセプターアゴニスト、レチノイド、急性前骨髄球性白血病治療薬）

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

2005年国産初構造ベース創薬システム開発商品化



ヒドロキシカルボラン（世界で初めてオルト、メタ、パラ全異性体のヒドロキシカルボラン（C<sub>2</sub>B<sub>10</sub>OH<sub>12</sub>）を求核置換反応で合成に成功（1999年）、現在は様々な医薬品、農薬や機能性材料のビルディングブロックとして利用されている）

**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。

**科学技術振興・社会貢献活動** ほぼ毎年国際査読論文発表・学会発表を行っており、国内外からの依頼を受けて国内外学術学会誌・科学雑誌のレフェリー及びエディター活動を行っています。

**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.molfuction.com/jp/>

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

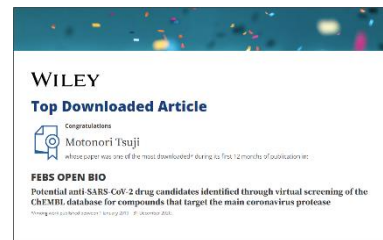
**代表** 辻 一徳（ツジ モトノリ） 博士（薬学） 東京大学  
1997年東京大学大学院薬学系研究科・薬学部教務補佐員、1998年東京大学大学院薬学系研究科博士研究員、1998年東京大学分子細胞生物学研究所研究員、1998年医薬品副作用被害救済・研究振興調査機構基礎的研究業務派遣研究員、2001年株式会社医薬分子設計研究所創薬研究部テーマリーダー研究員、2003年（至現在）分子機能研究所代表、2007年千葉大学大学院医学研究院招聘研究員兼任、2017年（至現在）東京医科歯科大学非常勤講師兼任、2021年（至現在）横浜国立大学非常勤教員兼任、2024年（至現在）大阪大学招聘教員兼任

**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、受託計算法学、創薬化学分野の人材育成事業

## 沿革

2003年07月01日 分子機能研究所創立  
 2003年07月01日 受託研究サービス開始  
 2005年08月07日 Homology Modeling for HyperChem リリース  
 2005年11月28日 Gaussian Interface for HyperChem リリース  
 2005年11月28日 ONIOM Interface for Receptor リリース  
 2005年12月01日 Homology Modeling Professional for HyperChem (HMHC) リリース  
 2006年06月05日 Docking Study with HyperChem (DSHC) リリース  
 2006年06月05日 Virtual Screening System リリース  
 2013年07月01日 分子機能研究所創立 10周年  
 2018年02月23日 AutoDock Vina In Silico Screenings Interface、rDock Interface リリース  
 2018年07月01日 分子機能研究所創立 15周年  
 2019年01月01日 MFDD インシリコ創薬受託研究サービス開始  
 2019年10月01日 受託計算サービス開始  
 2020年05月01日 国内最初の抗新型コロナウイルス (SARS-CoV-2) 薬候補化合物の同定に関する国際査読論文発表  
 2020年10月17日 COVID-19 治療薬候補化合物のインシリコスクリーニング研究で国内学会奨励賞受賞  
 2021年02月18日 抗新型コロナウイルス薬候補化合物に関する査読論文が FEBS Congress Award 対象論文としてノミネート  
 2022年06月16日 抗 SARS-CoV-2 薬に関する国際査読論文に対して Top Download Article 証明書が Wiley 社から授与  
 2023年07月01日 分子機能研究所創立 20周年



## 主要取引先

米 Hypercube 社  
 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  
 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

## 協力研究機関

立教大学、東京工業大学、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、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、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、東京大学、東京農工大学、名古屋大学、兵庫県立大学、弘前大学、北海道大学、北海道科学大学  
 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：大阪大学産薬科学研究所、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、京都府立医科大学、金城学院大学、甲南大学、修文大学、千葉大学、東京大学、東京医科歯科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、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、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

## 製品、受託研究・共同研究、独自技術に関するお問い合わせ先

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