

平成27年度北海道大学情報基盤センター共同研究成果報告書

1. 研究領域番号 A2（およびA3）
2. 研究課題名 実験と計算の融合による次世代計算創薬法の開発
3. 研究期間 平成27年4月1日～平成28年3月31日
4. 研究代表者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
前仲 勝実	北海道大学 大学院薬学研究院	教授	

5. 研究分担者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
棟朝 雅晴	北海道大学 情報基盤センター	教授	
児玉 耕太	北海道大学 薬学研究院	特任准教授	
姚 閔	北海道大学 先端生命科学研究院	教授	
広川 貴次	独立行政法人産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター	研究チーム長	

6. 共同研究の成果

下欄には、当該研究期間内に実施した共同研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、共同研究申請書に記載した「研究目的」と「研究計画・方法」に照らし、800字～1,000字で、できるだけ分かりやすく記載願います。文章の他に、研究成果を端的に表す図表を貼り付けても構いません。なお、研究成果の論文・学会発表等を行った実績（発表等の予定を含む。）があれば、あわせて記載して下さい。

現在までに、複数（26種、cavity48種）のターゲットに対して、デフォルトのパラメータでの計算の実施を行った。現状、docking simulationの準備、解析の概略手順の中で、本研究の中で特に特殊な点は、以下のとおりである。

昨年度は、cavity searchは、北大独自アルゴリズムであるPOCASAを使用した。また、東大ライブラリーのセットアップにはligprepを使用して行った。Docking algorithmには、産総研が提供しているMyprestoに実装されているsievgeneを使用した。Dockingのあとに、MTS（Multiple target screening）法を適応する点が本研究の新しい試みである。加えて、順次、wetでの評価ができるものから評価を行ったとこ

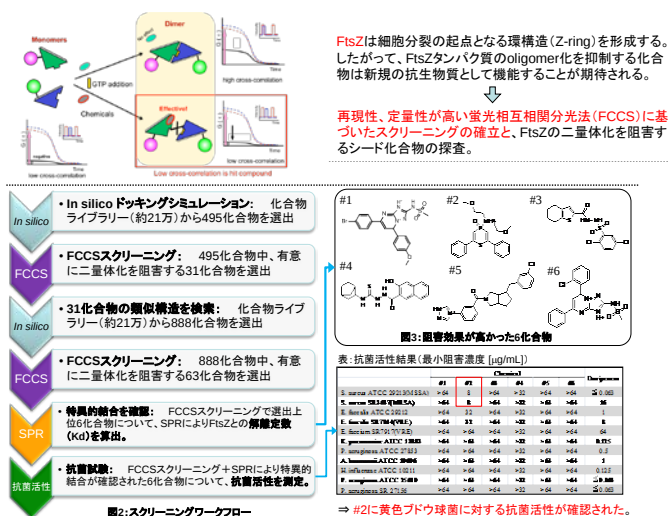


図1 FACSを用いたFtsZ特異的な抗菌剤のスクリーニング

ろ、3 種のターゲットに関して、ヒット化合物が得られた。そのヒット化合物の構造をもとに、東大化合物ライブラリー中の類似構造を検索し、類似度が約 0.7 位上のものを再度wetでの評価を行ったところ、1 種類のターゲット（FtsZ、詳細図 1）に対して、複数化合物の構造特異的な結合を確認することができた。これらの化合物について、抗菌活性試験を行ったところ、1 種類の化合物について黄色ブドウ球菌に対する抗菌活性が認められた。なお、この結果については、PLoS ONE に掲載された¹。

加えて、2015 年 7 月 9 日には、医療機器やライフログに関わるインフォマティクス関連の経営者であり、AMED の PO も務められる研究者をお招きし、以下のようなセミナーの開催を行い、約 80 名の参加者のもと、インフォマティクスに関わる幅広い研究について議論が行われた。

以下にシンポジウムの詳細を示す。

平成 27 年度 北海道大学情報基盤センター共同研究セミナー

<セミナー名>

本シンポジウムは、以下の各イベントの合同開催です。

・第 21 回 未来創薬イノベーションセミナー

目的：

北海道大学関係者に医療機器・ライフログに関わるインフォマティクス分野を身近に感じていただき、より興味をもっていただくこと。

日程：

2015 年 7 月 9 日 16:30~18:00

テーマ名：医療機器の事業化に必要なポイント

講師：内田 毅彦 株式会社 日本医療機器開発機構（JOMDD）代表取締役社長

要旨：

高いモノづくり力、技術力、医療水準を有する日本は医療機器産業で世界をリードしていて不思議でない。しかし、実際は毎年 7000 億円もの貿易赤字を垂れ流し続けている。他方、医薬品と比べて少ない資金や期間で開発が可能なケースも多く、起業もしやすい。それなのになぜ、日本では医療機器産業が育たないのか。日本人医師として初めて米国食品医薬局（FDA）にて医療機器審査官を務め、その後、米国大手医療機器企業にてメディカルディレクターやシリコンバレーにて医療機器コンサルタントとして勤務し、この分野に造形の深い演者が、日本において医療機器開発を成功させるために必要なポイントを中心に医療機器開発について紹介する。



医療機器の事業化に 必要なポイント

日 時 2015 年 7 月 9 日 (木) 16:30 ~ 18:00
場 所 北海道大学 理学部 5 号館 低層棟 2 階 大講堂

講 師
内田 毅彦
 株式会社 日本医療機器開発機構 (JOMDD) 代表取締役社長

高いモノづくり力、技術力、医療水準を有する日本は医療機器産業で世界をリードしていて不思議でない。しかし、実際は毎年 7000 億円もの貿易赤字を垂れ流し続けている。他方、医薬品と比べて少ない資金や期間で開発が可能なケースも多く、起業もしやすい。それなのになぜ、日本では医療機器産業が育たないのか。日本人医師として初めて米国食品医薬局 (FDA) にて医療機器審査官を務め、その後、米国大手医療機器企業にてメディカルディレクターやシリコンバレーにて医療機器コンサルタントとして勤務し、この分野に造形の深い演者が、日本において医療機器開発を成功させるために必要なポイントを中心に医療機器開発について紹介する。

第21回 未来創薬イノベーションセミナー
 平成27年度 北海道大学情報基盤センター共同研究セミナー

主催：文部科学省先端融合イノベーション創出拠点形成プログラム
 【未来創薬・医療イノベーション拠点形成】事業
 共催：北海道大学情報基盤センター
 お問い合わせ：先端生命科学研究所 門出 愛理 (内線：9041)

詳細は
こちらから
ご確認ください

北海道大学
 HOKKAIDO UNIVERSITY

¹ Shintaro Mikuni, Kota Kodama, Akira Sasaki, Naoki Kohira, Hideki Maki, Masaharu Munetomo, Katsumi Maenaka, Masataka Kinjo, Screening for FtsZ dimerization inhibitors using fluorescence cross-correlation spectroscopy and surface resonance plasmon analysis, PLoS ONE, 2015 Jul 8;10(7):e0130933

本セミナーは、大学院共通講義の一環としても行われ、受講者の医療関連企業への就職者数が毎年増加するとともに、2015 年度は受講者数 130 名超と大学院共通講義の中では、北大内で 2 番目に多い講義となり、学生の評価も非常に高かった。なお、参加者からは、「製薬業界の最新の動向、創薬プロセスを半年間で学ぶことができた自分が将来創薬をどんな位置で支えていきたいのか、深く考えるきっかけになった」とのコメントをいただいた。