研究テーマ 分子シミュレーション解析による医科学研究

所属 学術研究部医学系

教授 髙岡 裕
https://researchmap.jp/medacp2203

| | |
|---|---|
| 研究分野 | バイオインフォマティクス |
| キーワード | 計算創薬、薬効予測、副作用予測、病態解明 |

研究室URL： https://ebraille.med.u-toyama.ac.jp/hp/

## 研究の背景および目的

これまでに、抗がん剤の副作用に直結する薬物動態のコンピュータ予測、分子シミュレーションと数理モデル系を確立し特許取得し、その解析系で別の薬の副作用予測に成功、肺がん患者で新規に発見されたEGFR変異型delE746の立体構造と治療薬との結合能をin silico解析して結合安定性と薬効の相関を発見、新型コロナウイルスの感染力予測の実現、などのように副作用・薬効予測、創薬や病態解析について、スーパーコンピュータも駆使して研究を進めている。

■主な研究内容

## 研究テーマ（例）

- 抗体医薬の改変評価法の確立
- 新型コロナウイルス変異株の感染力予測
- 分子シミュレーションと数理モデルによるUGT1A1抱合能予測と副作用の病態解明
- 分子シミュレーションによるEGFR-TKIの世代別薬効予測法の確立
- コラーゲンの分子シミュレーションによるアルポート症候群の重症度予測法の確立
- 分子シミュレーションによる家族性アミロイドーシスの病態と治療薬の開発
- タンパク質機能を構造から制御する低分子化合物の探索

以上の研究テーマについて、基礎的なバイオインフォマティクス手法に加えて分子シミュレーションや数理モデルを駆使し、体系的な論理的根拠を基盤として技術開発をすすめ、迅速かつ革新的な計算創薬手法の実現を目指します。また、必要に応じてこれまでにも利用してきたスーパーコンピュータ利用も検討し、解析の高速化にも取り組みます。

## 期待される効果・応用分野

計算創薬（Drug Repurposing、核酸医薬設計）、
薬効予測（核酸医薬）、
副作用予測（分子標的薬、代謝酵素異常の影響）、
病態解明（アミノ酸置換が病因の疾患）

■共同研究・特許など

1. 酵素活性をコンピュータを用いたシミュレーションにより予測する方法　特許第5447383号
2. 核酸医薬候補：ＸＰＡ　ｐｒｅ－ｍＲＮＡのプロセシングにおけるエクソン３のスキッピングを誘導するアンチセンスオリゴヌクレオチド　特許第7033300号

富山大学研究者プロファイルPure URL：https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/