

# インシリコユニット代表課題名 (9課題)

分子動力学計算による構造生物学データを  
活用した構造ダイナミクス研究  
(横浜市立大)

モデリングとシミュレーションによる  
生体高分子の構造機能解析  
(量子科学技術研究開発機構)

大規模分子シミュレーションによるインシリコスクリー  
ニング支援と構造インフォマティクス技術の高度化  
(東京工業大学)

タンパク質の複合体構造・分子間相互  
作用・ダイナミクス・機能の予測と解析  
(東京大学)

分子モデリングおよびシミュレーションを  
活用したインシリコ創薬支援  
(産業技術総合研究所)

構造インフォマティクスとFMO計算を融合  
したインシリコスクリーニング支援研究  
(理化学研究所)

バイオマーカーおよび治療法開発を  
加速するデータ駆動型モデリング  
(大阪大学)

タンパク質の高次構造情報を利用した創薬等研究  
加速に向けたバイオインフォマティクス研究  
(産業技術総合研究所)

生薬データベースの高度化と  
構造創薬への応用  
(奈良先端科学技術大学院大学)

主にシミュレーションによるアプローチ

主に複合技術によるアプローチ

主にインフォマティクスによるアプローチ