

# 【新学術領域研究（研究領域提案型）】 理工系



## 研究領域名 化学コミュニケーションのフロンティア

京都大学・大学院薬学研究科・教授 かけや ひであき  
掛谷 秀昭

研究課題番号：17H06400 研究者番号：00270596

### 【本領域の目的】

自然環境場における、微生物間、動植物—微生物間、ヒト—細菌叢間などの化学コミュニケーション分子の真の生物学的意義が解明されている例はごくわずかであることから、化学コミュニケーション分子を利用した生物機能制御の実現には、多様な化学シグナルの深い理解が不可欠である。

本領域では、多種多様な化学コミュニケーションの統合的理解にきわめて有効な「革新的高次機能解析プラットフォームの構築」を行い、「天然物リガンドの真の生物学的意義の解明」及び「ケミカルツール分子・創薬シーズ開発」を推進することにより医療・農業・食糧分野などに貢献し、最終的には自然環境における多様な生物種における化学コミュニケーションの解明と制御を主眼とした「分子社会学」という新しい学問領域の確立を目指す。



### 【本領域の内容】

本研究領域では3つの研究項目を設定し、各研究グループの有機的連携体制をとりながら、化学コミュニケーションの統合的理解を目指して、生物活性リガンドのフロンティア研究を推進する。

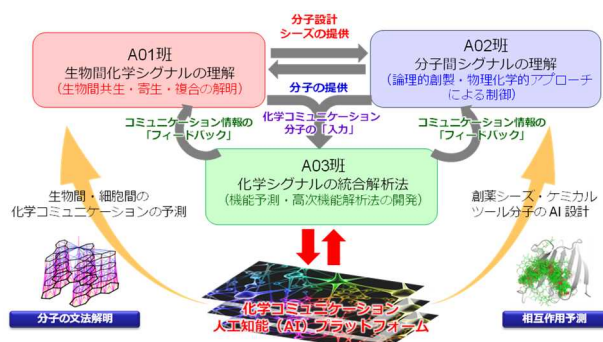
研究項目 A01（生物間化学シグナルの理解）：化学コミュニケーションの中心を担う生物活性リガンドの探索・同定・機能解析、ならびに標的指向型表現型スクリーニングの構築・実証

研究項目 A02（分子間シグナルの理解）：化学コミュニケーションの基盤となる分子間シグナルの理解・制御を目指した生物活性リガンドの論理的創製及び物理化学的アプローチによる理解・制御

研究項目 A03（化学シグナルの統合解析法）：化学コミュニケーションの中心を担う生物活性リガンドの探索・同定・機能予測・機能解析を高感度かつ高効率に展開するためのシステム構築・実証

これらの項目において、より斬新で挑戦的な研究課題、若手研究者による萌芽的・意欲的な研究課題、

本領域の基盤技術や連携組織を活用する研究課題の公募を行う。



### 【期待される成果と意義】

本領域研究により、化学コミュニケーションの統合的理解にきわめて有効な「革新的高次機能解析プラットフォームの構築」を達成し、「天然物リガンドの真の生物学的意義の解明」、ならびに新たなコンセプトに基づいた「ケミカルツール分子・創薬シーズ開発」の実現が可能になり、医療・農業・食糧分野などの発展に寄与する。さらには、自然環境における生物間化学コミュニケーションの解明と制御を主眼とした「分子社会学」という新しい学問領域の確立が期待される。

また、本領域研究の推進により、異分野間の共同研究、国際共同研究、国際ネットワーク形成が促進され、本領域の国際的プレゼンスの格段の向上及び関連学際研究領域において国際的にもトップレベルとなりうる若手研究者の育成が期待される。

### 【キーワード】

化学コミュニケーション、化学シグナル、分子社会学、天然物化学、生物活性リガンド、ケミカルバイオロジー、ケミカルゲノミクス、化学生態学、ケモインフォマティクス、人工知能、バイオインフォマティクス

### 【研究期間と研究経費】

平成29年度—33年度  
1,108,700千円

**[Grant - in - Aid for Scientific Research on Innovative Areas(Research in a proposed research area)]**  
**Science and Engineering**



**Title of Project : Frontier research of chemical communications**

Hideaki Kakeya  
(Kyoto University, Graduate School of Pharmaceutical Sciences,  
Professor)

Research Project Number : 17H06400      Researcher Number : 00270596

**[Purpose of the Research Project]**

Many natural products have served as pharmaceuticals, agrochemicals, and their leads because of the structural and biological diversity. However, essential roles of natural products as chemical communication molecules among microbes, animals, plants, et cetera have not been fully elucidated. Integrated understanding of various kinds of chemical communications could therefore accelerate functional regulation by utilizing chemical communication molecules.

This research project aims at not only developing innovative high-order analysis platforms, but also at clarifying essential roles of natural products as chemical communication molecules in the natural environment, leading to development of useful chemical tools as well as pharmaceuticals/agrochemicals leads. In addition, this research project would contribute to the advancement in medical, agricultural, and food sciences, as well as open up a new discipline, "Molecular Sociology", which would focus on the frontiers in chemical communications in a variety of biological species.



**[Contents of the Research Project]**

In this research area, the following three research groups interact closely with each other.

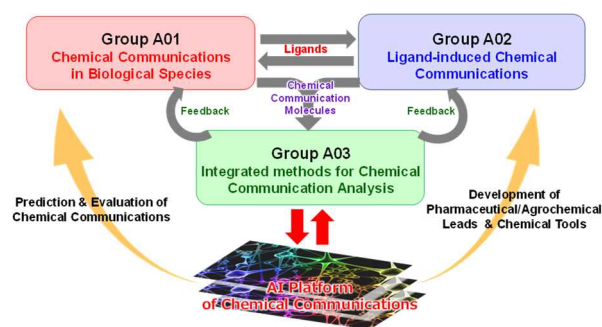
Group A01 (Chemical Communications in Biological Species): Screening and development of bioactive natural products as chemical communication molecules by a target-based phenotypic screening approach.

Group A02 (Ligand-induced Chemical Communications): Development of bioactive synthetic ligands as chemical communication molecules by theoretical design & synthesis and physicochemical approach.

Group A03 (Integrated Methods for Chemical Communication Analysis): Development and application of integrated platforms for identifying

chemical communication molecules and analyzing their modes of action.

Proposal with synergistic, transversal, and applied perspectives will be openly recruited for these research items.



**[Expected Research Achievements and Scientific Significance]**

This research project will establish a new scientific principle of "Molecular Sociology" in regard to chemical communications in the natural environment, which will result in the paradigm shift not only in natural product chemistry but also in chemical biology. Moreover, a new class of useful chemical tools as well as pharmaceutical and agrochemical leads will be developed, contributing greatly to human welfare in the future.

We also focus on international collaboration among interdisciplinary research fields, leading to international network development and bringing up young scientists broader views and higher expertise.

**[Key Words]**

Chemical Communications, Chemical Signal, Molecular Sociology, Natural Product Chemistry, Bioactive Ligand, Chemical Biology, Chemical Genomics, Chemical Ecology, Cheminformatics, Artificial Intelligence (AI), Bioinformatics

**[Term of Project]**      FY2017-2021

**[Budget Allocation]**      1,108,700 Thousand Yen