



【1000～1300万円】VP of Computational Chemistry

IT系プロジェクトマネージャーのご経験のある方は歓迎です。

募集職種

人材紹介会社

株式会社ジェイ エイ シー リクルートメント

採用企業名

非公開

求人ID

1587080

業種

医薬品

雇用形態

正社員

勤務地

東京都 23区

給与

1000万円～1300万円

勤務時間

09:00～18:00

休日・休暇

詳細は求人ご紹介時にご案内いたします。

更新日

2026年05月30日 13:00

応募必要条件

キャリアレベル

中途経験者レベル

英語レベル

ビジネス会話レベル

日本語レベル

ネイティブ

最終学歴

大学卒：学士号

現在のビザ

日本での就労許可が必要です

募集要項

【求人No NJB2344205】

【業務内容】

- ・ FEP計算の設計・実行
大規模FEP計算プロジェクトの計画・推進
創薬各ステージ (Target ID/Validation、Hit ID、Hit to Lead、Lead Optimization) におけるFEP活用戦略の立案
バーチャルスクリーニングの精密化、アロステリック部位探索、選択性予測の実装
MDシミュレーションおよびFEP計算に関する技術的指導
- ・ データ品質管理・バリデーション
SPR、ITC等バイオフィジカルデータとの比較によるFEP計算精度の検証

結合親和性データの標準化プロトコル策定
統計解析による計算結果の信頼性評価
データ品質管理・バリデーション体制の構築

- ・ AIモデル開発支援
従来FEP計算を大幅に高速化するAI予測モデルの開発サポート
機械学習用データセットの設計・前処理
計算化学的観点からのAIモデル妥当性検証
- ・ 実用化・事業化支援
外部学会・技術検討会への参画
製薬・農薬・化粧品企業との共同研究における技術的リード
創薬コンソーシアムとの連携推進

スキル・資格

《必須要件》

- ・ 実務経験
製薬会社での計算化学業務 5年以上
FEP計算の実務経験 2年以上
創薬プロジェクトにおけるSBDD実務経験
タンパク質 リガンド相互作用解析の実務経験
- ・ 技術スキル
MDシミュレーション、FEP計算の理論的理解
Python等によるデータ解析・統計処理スキル
SPR、ITC等バイオフィジカルアッセイとの連携経験

《歓迎要件》

- ・ 大手製薬会社での創薬研究 7年以上
- ・ 国際誌での査読論文発表実績
- ・ AlphaFold / Boltz 2等の構造予測技術と計算化学の組み合わせ経験

会社説明

ご紹介時にご案内いたします