

IT創薬技術と化学合成技術の融合による革新的な中分子創薬フローの事業化

東京工業大学 × 川崎市

東工大の情報・生命理工学等とスパコン技術を活かし、IT創薬技術、人工ペプチド・人工核酸合成技術等のコア技術の融合による革新的な中分子創薬事業フローを構築します。川崎市内企業等との産学官連携により、基礎・基盤研究と創薬事業を橋渡しするイノベーション・エコシステムを形成することで、中分子創薬の開発効率の大幅な向上を目指します。

■ 事業プロデューサー



ます や けい い ち
舩屋 圭一

ペプチドリーム株式会社
取締役副社長
前職は三菱化学株式会社、Novartis Pharma KK 筑波研究所、Novartis Pharma AG Basel Switzerland Oncology

IT創薬技術を人工ペプチド医薬品及び人工核酸医薬品へと融合・応用することで、革新的次世代医薬品創製へと繋げていきます。それを日本の玄関口である羽田空港の近隣の川崎市を中心に、多くの民間企業を巻き込みながら産学官連携を最大限生かし行っていく予定です。私達が目的とするイノベーション・エコシステムが形成・確立出来れば、これまで長い年月を要するのが当たり前であった創薬研究開発を大幅に効率化出来ると考えています。

■ 事業化プロジェクト

PJ1: AIスパコンを駆使した中分子向けIT創薬技術 (東京工業大学 教授 秋山 泰)

ペプチド分子を用いた創薬開発を進める上で未解決の課題となっている体内持続性と細胞膜透過性の2つの問題に対して、大規模分子シミュレーションや機械学習等の技術を駆使して、計算機上で迅速に予測できるシステムを開発し、事業化します。



東工大 中分子IT創薬研究推進体 殿町拠点

PJ2: 生体安定性と結合性の高い創薬向け人工核酸 (東京工業大学 准教授 清尾 康志)

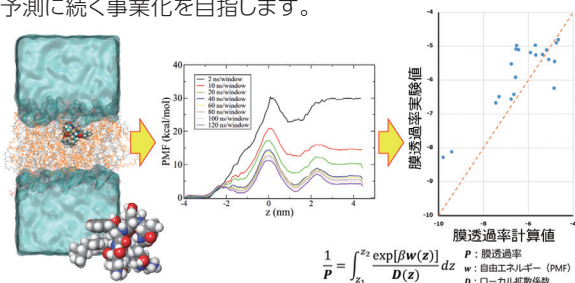
核酸分子の創薬技術開発の課題である吸収・分布・代謝・排泄・毒性・薬効(薬効+ADMET)に対し、ITによる予測技術と核酸ライブラリーの構築・多様化により、核酸医薬支援事業として事業化を行います。

■ 事業の進捗状況

PJ1: AIスパコンを駆使した中分子向けIT創薬技術

体内持続性(PPB値)の予測においては、実験データの収集を進めるとともに、機械学習に基づいた予測モデルを構築しました。現在はさらに多彩な人工残基への対応や、より複雑なペプチドへの対応を進めています。2021年頃までの事業化を目指して関連企業との連携を進めています。

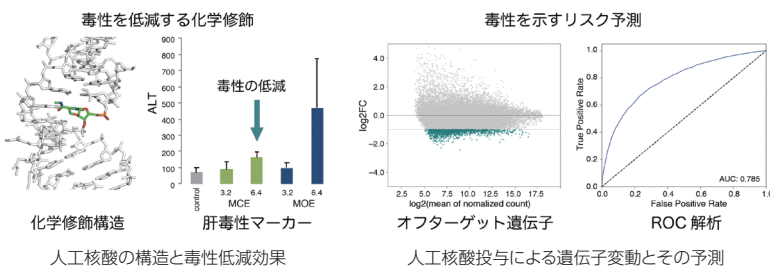
細胞膜透過性の予測においては、拡張サンプリング法と大規模並列処理の併用による高速な分子動力学シミュレーションに基づいて膜透過性を推定する方法を確立しました。より複雑なペプチドへの対応を進めるとともに機械学習との併用を実現し、体内持続性予測に続く事業化を目指します。



分子動力学シミュレーションによるペプチド細胞膜透過性の推定

PJ2: 生体安定性と結合性の高い創薬向け人工核酸

核酸ライブラリーの新しい合成法を確立し、アンチセンス核酸に役立つ多様な人工核酸を、短期間に合成する技術を開発しました。また、合成した人工核酸の生理活性試験より、毒性の低減や高い活性を示す人工核酸を見つけました。今後、さらに動物実験へと研究を進め、医薬品候補となりうる人工核酸を開発する計画です。ADMET予測技術に関しては人工核酸の投与による細胞内での遺伝子発現量の変化を、人工核酸の配列のみから予測する技術を開発しました。今後、動物に対する毒性予測技術を開発し、人工核酸ライブラリーと組み合わせ、核酸医薬の基盤技術として事業化を目指します。



人工核酸の構造と毒性低減効果

人工核酸投与による遺伝子変動とその予測

基盤構築プロジェクト

「中分子創薬に関わる次世代産業研究会(IMD²)」はコロナ禍により令和2年度第8回からWebinarによる開催に切り替えました。これにより参加者は200名規模に増加しています。IMD²では、最先端の中分子創薬に関わる研究開発の講演やIT・創薬関連の会員企業による事業紹介を継続しています。その結果、会員登録は140を超え、異業種交流による継続的なイノベーションが期待できる基盤形成が進んでいます。



第8回IMD²(2020/6/26)

問合せ先

東京工業大学 中分子IT創薬研究推進体(MIDL) 殿町拠点

〒210-0821 神奈川県川崎市川崎区殿町3-25-10 RGB2-A-1C TEL : 044-589-8691

E-mail : office@midl.titech.ac.jp

URL : https://www.midl.titech.ac.jp