



AI創薬によるADC/APC設計支援

研究代表者 大上 雅史 東京科学大学 情報理工学院 准教授

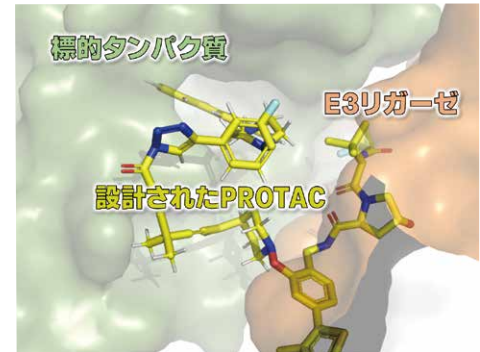
研究のゴール 1 型糖尿病の治療法開発

研究の特徴

治療薬となる薬を AI（人工知能）によって創り出す試み（AI 創薬）が近年進んでいます。この研究では、国立がん研究センターの安永正浩先生と協力して、標的細胞に対して強力に治療効果を示すことができる次世代型抗体医薬を AI で設計する技術開発に取り組みます。

研究概要

実験データの蓄積に伴い、既存の薬剤や化合物の情報から AI 技術を利用して未知の化合物の性質を予測することが可能になりつつあります。しかし、次世代型抗体医薬である ADC（Antibody-Drug Conjugate）や APC（Antibody-PROTAC Conjugate：タンパク質を分解する役割を備えた特別な ADC）と呼ばれる分子種（物質を構成する粒子）ではデータの蓄積が進んでおりません。国立がん研究センターの安永正浩先生が手掛けてこられた 1 型糖尿病治療のための抗体（ウイルス等が侵入した際に異物として攻撃や体外に排出する働きを持つタンパク質）開発の情報を活用して、AI による新たな次世代抗体医薬の候補物質の生成・提案を目指します。



計算機による PROTAC 分子デザイン。標的のタンパク質（緑）と、E3 リガーゼ（橙）の、2 つのタンパク質を繋ぐ接着剤のように働く。

これまでの研究結果・成果

APC に使われる PROTAC という物質は、標的タンパク質をプロテアソーム（細胞の中で不要になったタンパク質を分解するしくみ）による分解に誘導する分子で、どんな標的タンパク質にも作用できる可能性を持つ次世代の薬剤です。標的タンパク質に分解の目印を付けるタンパク質（E3 リガーゼ）を結びつける接着剤のような働きをします。普通の薬剤であれば AI やシミュレーションによる計算技術の開発が進んできていますが、PROTAC についてはまだ自由に設計することが難しい状況です。我々は世界に先駆けて、PROTAC を計算機でうまく設計するための技術の開発を行ってきました。本研究では、我々の基盤技術を発展させ、抗体と PROTAC を結合させた ADC = APC（新たな次世代抗体医薬）の設計に挑戦します。

現在の状況

AI や分子シミュレーションなどの計算技術は、近年著しい発展を遂げており、欲しい性質を持たせた分子を計算によって自在にデザインできるようになりつつあります。しかし、ADC、PROTAC、APC などの分子についてはまだ計算技術が整っておらず、これら次世代型の分子の開発に貢献する計算技術の開発を進めています。現在は Boltz-2 という AI の一種を用いて分子デザインの検証を行っています。

この研究で患者の生活や他の研究にどのような波及効果があるか(期待されるか)

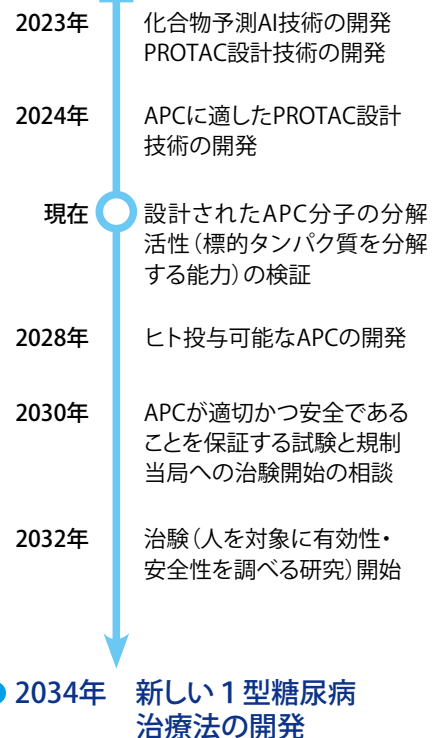
本研究課題は基盤的なものなので、1 型糖尿病に限らない多くの疾患への新しい治療薬開発に貢献できる可能性があります。PROTAC 自体も新しい薬剤で、まだ承認された PROTAC 薬剤は存在していませんが、広範な疾患への適応可能性から世界中で研究開発が加速しています。

患者・家族、寄付者へのメッセージ

1 つの新薬が生まれるまでに 10 年以上の時間と 3000 億円以上のコストがかかると言われています。しかし、AI に代表される計算技術は、そのコストを大幅に削減できる可能性を秘めています。創薬の基盤技術を扱う本研究課題に、みなさまのご理解とご支援を頂けることを大変感謝しています。1 型糖尿病の完治を目指して、取り組んで参ります。

ロードマップ

現在の進捗率
約20%



●大上 雅史 先生プロフィール 【①座右の銘 ②趣味 ③特技 ④尊敬する人 ⑤好きな食べ物】

①やればなんとかなる ②Saxophone演奏、キャンプ、猫、ポーカ、麻雀 ③絶対音感 ④YOASOBI ⑤寿司