

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:

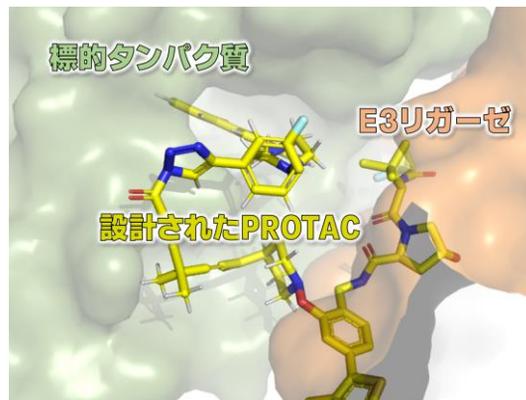
治療薬となる薬をAIによって創り出す試み(AI創薬)が近年進んでいます。この研究では、国立がん研究センターの安永正浩先生と協力して、ADCやAPCと呼ばれるタイプの薬をAIで設計する技術開発に取り組みます。

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機械学習/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ADC (antibody-drug conjugate) やタンパク質分解促進薬APC (antibody-PROTAC conjugate) と呼ばれる分子種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開発の情報を活用して、AIによる新たな候補物質の生成・提案を目指します。

これまでの研究結果・成果:

PROTACは、標的タンパク質をプロテアソーム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。標的タンパク質とE3リガーゼタンパク質を繋ぐ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APCの設計に挑戦します。



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。

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。

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、寄附者へのメッセージ

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しています。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
10%