

MOE フォーラム 2017

Structure-based drug design の手法を活用した創薬シード創製

小葦泰治^{1,2}

協和発酵キリン株式会社 研究開発本部 研究機能ユニット

¹創薬基盤研究所, ²化学研究所

協和発酵キリンでは、4大モダリティ（抗体医薬、核酸医薬、低分子創薬、再生医療）を軸とした、Technology-driven 創薬により、重点疾患領域（腎、癌、免疫・アレルギー、中枢神経）の新規医薬品の研究開発を行っている。この Technology-driven 創薬を支えている主要基盤技術として、タンパク質立体構造に基づく薬剤設計（Structure-based drug design, SBDD）があり、低分子・抗体・核酸医薬の各研究テーマで活用されている。本講演では、協和発酵キリンで実施した、以下の SBDD 研究事例を紹介する。

事例①：低分子創薬における計算科学主導の SBDD 研究事例

事例②：計算科学と、NMR や X 線結晶構造解析に代表される生物物理的分析技術を相補的に活用した SBDD 研究事例 —siRNA 活性増強素子の創出

なお、協和発酵キリンの計算科学業務は、統合計算化学システム MOE と、株式会社モルシスの技術サポートにより支えられており、その点についても講演内で言及する。