

「AI創薬～AIと構造生物学の連携による
新規Protein-Protein Interaction(PPI)阻害化合物の探索」

大澤匡範 教授

(慶應義塾大学 薬学部)

日時：2025年1月16日(木) 16:20－17:20

場所：12号館106室

概要

2019年に出現し急速に広がったSARS-CoV-2は、一時期の感染拡大は収まったが、依然として新型コロナウイルス感染症(COVID-19)の流行は続いている。そのため、在宅医療の促進や変異株の出現に備えて、革新的治療薬を迅速に創製する技術確立することが必要である。

我々は、ウイルス感染など疾病の原因となるProtein-Protein Interaction (PPI)を阻害する合成中分子化合物を創製する「多分野融合創薬プラットフォーム」を構築した。このプラットフォームは以下の技術で構成される。(1) PPI阻害に特化した合成中分子化合物ライブラリー、(2) AI・ケモインフォマティクスによるバーチャルスクリーニング技術、(3) PPI阻害やウイルス感染阻害活性を指標とした実験的スクリーニング技術、(4) 化合物と標的タンパク質との結合様式を解明する構造生物学的解析技術、(5) 実験情報・化合物の特性を統合しドラッグデザインを行うインシリコ創薬技術、(6) デザインした化合物を合成する化学合成技術。まだまだ道半ばではあるが、最新の成果を紹介したい。

連絡先：理学研究科 化学専攻 池谷鉄兵(内線:3536、e-mail: tikeya@tmu.ac.jp)