

人工知能・情報理論および量子生命科学の統合による 創薬技術の開発とその応用

～生命のはたらきのメカニズムに基づく医薬品のデザインを目指して～

¹ 兵庫県立大学大学院・生命理学研究科

² Yonsei University College of Medicine

©H3 すみたくや 驚見拓哉¹、D1 てらだりゅういちろう 寺田隆一郎¹、H5 にしがみひろし 西上博士¹、
Jiyoung Kang²、教授 たてのまさる 舘野賢¹

キーワード

医薬品の設計, 転写制御ネットワークシステム, 生体高分子の立体構造, 電子ダイナミクス, 生体触媒反応, コンピュータ・シミュレーション

研究概要

高齢化社会に伴い, 近年, 認知症などの疾病の増大が社会問題となっています。それらの病気の原因および治療の標的(分子)を解明し, さらにその作用を制御する医薬品の開発が, ますます重要になっています。

我々は, 生命の設計図であるゲノム全体(マクロ)から, 生体分子の電子状態(ミクロ)までを解析する技術の開発と応用を進めています。そのために, 人工知能(図1)や情報理論と, 分子ドッキング法や電子構造計算(図2)などを統合し, 論理的で効率的な医薬品の設計技術の開発を推進しています。

アピールポイント

1) 転写を制御するタンパク質が結合する, ゲノム DNA 上の特定の塩基配列を, ゲノム全体から高精度に決定する新しい情報システム MODIC を我々は開発しました [1]。さらに人工知能技術を応用し, MODIC の機能を一層拡張する DIMON を開発しました (図1) [2]。

2) タンパク質には, 生体反応を触媒する酵素もあります。我々は, 独自の高度な電子ダイナミクス・シミュレーション技術を開発し, 新しい反応メカニズムを解明してきました (図2) [3, 4]。

これらの技術を統合して用いて, アルツハイマ病などの精神疾患を早期に診断発見するために不可欠な分子イメージング剤や, その治療薬の開発などを行っています。

[1] *Nucleic Acids Research*, **2012** (2012), 1-14.

[2] *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86** (2017), 074803.

[3] *J. Am. Chem. Soc.*, **132** (2010), 2751-58.

[4] *J. Phys. Soc. Jpn.*, **87** (2018), 034804.

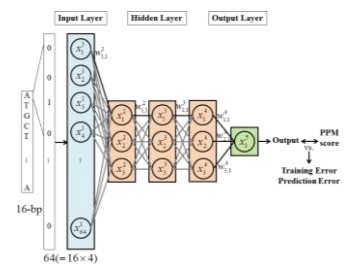


図1 人工知能の応用 [2]

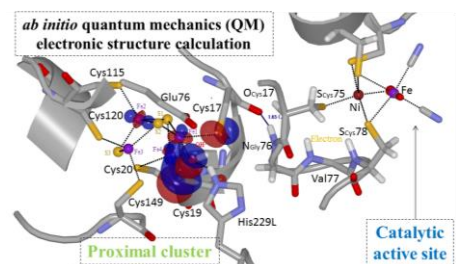


図2 電子構造計算の例 [4]