

田沼 靖一 Sei-ichi TANUMA (東京理科大学 薬学部 薬学科 教授)  
 高澤 涼子 Ryoko TAKASAWA (東京理科大学 薬学部 薬学科 講師)  
 佐藤 聡 Akira SATO (東京理科大学 薬学部 薬学科 講師)

## 研究の目的

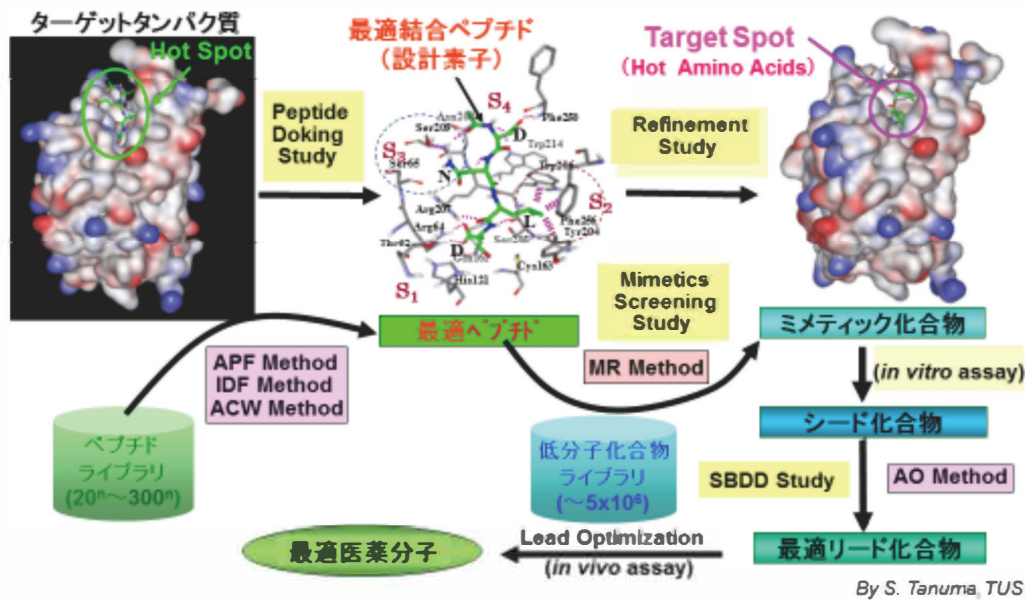
21世紀のゲノム医療は、疾患ゲノムビッグデータ解析に基づく「個別化医療」が求められています。それを現実のものとするには、個々人の疾患標的分子に対する最適医薬品リード化合物を分子設計できる新しい創薬方法論による「個別化創薬」のプラットフォームを確立することが不可欠です。現在、多くの製薬企業で行われている従来型のHTS/CCによる創薬手法では、膨大な時間と労力、莫大な費用がかかるにもかかわらず成功率が低いのが現状です。このような状況をブレークスルーするために、独自のin silicoゲノム創薬システム" COSMOS"を構築し、高い成功率の創薬開発を目的として、研究を進めています。

## 研究の概要

従来型の創薬では難しいと言われているタンパク質間相互作用を標的とした、これまでにない創薬方法論の実装システムとして、COSMOS法を開発しました。そのコンセプトは、創薬標的タンパク質の活性/制御部位 (Hot Spot) に対して、相互作用する最適結合ペプチドをin silico手法で同定し、それを設計素子として、独自の結合立体座標を再精密化することによって、低分子化合物への変換設計と自動最適化を行うものです。

## タンパク質間相互作用を標的とした新しい創薬戦略

COSMOS: Conversion to Small Molecules through Optimized-peptides Strategy



## 今後の展開

COSMOS法の汎用性の検証と新規リード化合物の創製を、製薬企業と連携して実施し、新薬開発へと展開を進めています。

- 関連制度: 科学研究費助成事業  
 平成27年度 基盤研究(C)  
 平成28年度 基盤研究(B)
- 知的財産権: 特許第4612270号「生理活性ペプチドの設計法及びその用途」
- 企業との共同研究経験多数

