

インテージヘルスケア、東京理科大学 AI 創薬による次世代 BET 阻害剤開発の共同研究を開始

株式会社インテージヘルスケア（本社:東京都千代田区、代表取締役社長：仁司与志矢）と学校法人東京理科大学（本部：東京都新宿区、理事長：浜本 隆之）は、AI 創薬による次世代 BET 阻害剤^{*1} 開発の共同研究を開始しました。



東京理科大学薬学部薬学科・高橋研究室（教授：高橋秀依）では、抗不安薬や睡眠薬として用いられているベンゾジアゼピン類の立体構造について、軸不斉^{*2} の観点から標的分子（特定の疾患や病気の治療に関連する分子）との相互作用を調べ、より良い医薬品の候補となる化合物を創出すべく、研究を進めています。

今回、東京理科大学が行う軸不斉を考慮した化合物合成に関する研究と、インテージヘルスケアなどのもつ AI 創薬プラットフォーム「Deep Quartet（ディープカルテット）」をはじめとする AI 技術を活用し、次世代 BET 阻害剤の開発に関する共同研究を行います。

共同研究では、インテージヘルスケアが化合物（新薬の候補となるもの）のデザインを行い、東京理科大学が新規化合物の化学合成と評価実験を行うことで、新たな構造のリード化合物の創出を目指します。

インテージヘルスケアは株式会社理論創薬研究所、株式会社アフィニティサイエンスとともに、AI 創薬による実践的な新規化合物デザインを製薬企業および大学などの研究機関と進めており、今回の共同研究はインテージヘルスケアが実施する「インテージヘルスケア AI 創薬アカデミックプログラム（INTAGE Healthcare AI drug discovery Academic Program : IAAP）」の一環として実施するものです。

また、本共同研究は大阪市の「大阪市イノベーション創出支援補助金（令和 5 年度）」に採択され、補助事業として実施いたします。

※ 1. BET 阻害剤：プロモドメイン含有タンパク質（BET:Bromodomain and extraterminal）を標的とした薬剤です。プロモドメイン含有タンパク質は、がんや炎症性疾患、生活習慣病の治療薬の標的分子として有望であり、現在多くの製薬企業が BET 阻害剤の研究を進めています。

※ 2. 化合物の軸不斉：二つの平面を結ぶ単結合（結合軸）の回転が妨げられて生じる動的な不斉（物質の分子内において、対称的でない構造を持つこと）であり、ベンゾジアゼピンなどのアミド（有機化合物の一種）を含む医薬品の多くに軸不斉が潜在している可能性があります。

【「インテージヘルスケア AI創薬アカデミックプログラム」について】

AI創薬プラットフォーム「Deep Quartet」などAIによる計算アプローチにより新薬開発の化合物探索及び化合物デザインを行うとともに、インテージヘルスケアが化合物の提供までを行うことにより、アカデミアの持つ研究テーマにおいて医薬品候補化合物を見出す共同研究によるスタートアッププログラムです。

アカデミアの持つ研究テーマとモデルに対して、インテージヘルスケアらがAIによる化合物デザインを行い実際の化合物までを提供、アカデミアにて *in vivo* ないしは *in vitro* の評価実験を行い、新薬の候補化合物を見出そうとするものです。

このプログラムによりAI創薬による医薬品開発を促進し、加速させます。

【「Deep Quartet(ディープカルテット)」について】

AI創薬プラットフォーム「Deep Quartet」は、インテージヘルスケアと株式会社理論創薬研究所、株式会社アフィニティサイエンスが3社連携で提供するサービスです。「Deep Quartet」は、深層強化学習の技術である(1)Deep reinforcement learning、ファーマコフォアモデルを用いるソフトウェア(2)LigandScout、網羅的なターゲット予測を可能とする機械学習ベースの技術(3)CzeekS を組み合わせた一連のフローであり、ここに(4)メディシナルケミスト(有機合成化学者) の知見を加えることで、Quartet（四重奏）によるAI創薬プラットフォームを実現しています。

技術の詳細や事例については、以下の論文を参照ください。

- Design and synthesis of DDR1 inhibitors with a desired pharmacophore using deep generative models. ChemMedChem 2021;16:955-58.
- Strategies for design of molecular structures with a desired pharmacophore using deep reinforcement learning. Chem Pharm Bull (Tokyo) 2020;68(3):227-33

【大阪市イノベーション創出支援補助金概要】

本共同研究は大阪市イノベーション創出支援補助金を受けて実施します。概要は以下の URL をご参照下さい。

<https://www.city.osaka.lg.jp/keizaisenryaku/page/0000586686.html>

【株式会社インテージヘルスケア】 <https://www.intage-healthcare.co.jp/>

株式会社インテージヘルスケアは、ヘルスケア領域のマーケティングリサーチおよび医薬品開発・製造販売後調査・安全性業務支援をコアビジネスと位置付けています。インテージグループのヘルスケア領域を担う各社[※]と一体となり、ソリューションを提供。それにより、ヘルスケア領域のあらゆる課題に対して、「医療消費者」起点のデータの価値化による、最適な意思決定をサポートしていきます。

※ 株式会社協和企画、株式会社インテージリアルワールド、株式会社プラメド、Plamed Korea Co., Ltd.

【学校法人東京理科大学】 <https://www.tus.ac.jp/>

東京理科大学は、理系分野を専門とする私立大学です。7つの学部と32の学科、そして7つの研究科と30の専攻を持つ大学院を有しており、幅広い分野の研究が行われています。また、多彩な教育プログラムや国際交流など、学生の成長を支援する施策にも力を入れています。

【本件に関するお問い合わせ先】

株式会社インテージヘルスケア

事業開発本部：村上（むらかみ）

広報担当：川畑（かわばた）

TEL: 03-5294-8393（代）

問合せ先：<https://www.intage-healthcare.co.jp/contact/service/pr-ihc@intage.com>

東京理科大学

産学連携機構

Tel : 03-5228-7440

問合せ先 e-mail : ura@admin.tus.ac.jp