



東大先端研

Research Center for
Advanced Science and Technology
The University of Tokyo

FUJITSU



2018年6月13日

東京大学先端科学技術研究センター

富士通株式会社

興和株式会社

東京大学先端科学技術研究センター、富士通、興和が IT創薬により、従来のがん治療薬に抵抗性を示すがんにも効果が期待できる 新規低分子化合物の創出に成功

東京大学 先端科学技術研究センター(所在地:東京都目黒区、所長:神崎 亮平、以下、東大先端研)と、富士通株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:田中 達也、以下、富士通)、興和株式会社(本社:愛知県名古屋市、代表取締役社長:三輪 芳弘、以下、興和)は、コンピュータ上で仮想的に設計・評価するIT創薬により、がんの原因となるタンパク質(以下、標的タンパク質)の阻害活性(注1)を持ち、従来のがん治療薬に抵抗性を示すがんにも効果が期待できる新規低分子化合物を創出することに成功しました。

今後、興和は本研究成果を創薬に結びつけるべく、今回の研究で得た低分子化合物を改良していく予定です。

【研究概要・役割分担】

IT創薬の共同研究は、2011年6月に東大先端研と富士通で開始し、同年7月に興和が参画し、複数の創薬標的に関する研究を行ってきました。

本共同研究は、従来のがん治療薬に抵抗性を示すがんに対し、その原因となるタンパク質を創薬標的として選択し2015年12月に開始しました。富士通はIT創薬により阻害活性があると予想される低分子化合物を設計し、興和は低分子化合物の合成と実験による阻害活性測定を行いました。東大先端研は創薬標的に関する医学的見地に基づく情報を提供するという役割を担いました。

またこの共同研究期間中、富士通と株式会社富士通研究所(本社:神奈川県川崎市、代表取締役社長:佐々木 繁、以下、富士通研究所)は、IT創薬技術の改良を重ね、精度と性能を向上してきました。

【共同研究の成果】

本共同研究で、富士通は独自の技術を結集させ、標的タンパク質の働きを抑える効果があると期待される化学構造を興和に提供しました。具体的には、医薬候補化合物設計技術(注2)と今まで培ってきた創薬の知見を取り入れ、合成可能な低分子化合物の構造をコンピュータ上で設計し、高精度活性予測技術(注3)を改良したM²BAR法(注4)を用いて、低分子化合物と標的タンパク質の結合強度を計算して絞り込みました。これに量子力学に基づく高精度な立体配座解析(注5)の結果も考慮に入れました。

興和は、富士通が設計した低分子化合物を合成し、その中に目標とする阻害活性を示す化合物を確認しました。また、興和はこの化合物と化学構造が似ている低分子化合物を複数合成し、一連の化合物にも目標とする阻害活性を示すことを確認しました。興和は現在、これら化合物の X 線結晶構造解析による複合体構造を検証中であり、今後、本研究成果を創薬に結びつけるべく今回の研究で得た低分子化合物を改良していく予定です。

東大先端研、富士通、興和は、本共同研究を通じて、IT 創薬により標的タンパク質への阻害活性を持ち、従来のがん治療薬に抵抗性を示すがんにも効果が期待できる新規低分子化合物を創出することに成功しました。

以上

【 注釈 】

- (注 1) 阻害活性：疾患を引き起こす原因と考えられるタンパク質に化合物が結合し、タンパク質の機能を抑制する度合い。通常、化合物の濃度で表される。
- (注 2) 医薬候補化合物設計技術：疾患を引き起こす原因と考えられるタンパク質が機能する部位に結合して、タンパク質の働きを抑える低分子化合物を設計する技術 OPMF(オーピーエムエフ)。富士通が開発。
- (注 3) 高精度活性予測技術：分子動力学計算をベースに、医薬候補化合物の阻害活性を実験に匹敵する高い精度で予測するシステム MAPLECAFEE(メープルカフェ)と、原子間に働く力の精緻なパラメーターを生成するソフトウェア FF-FOM(エフエフフォム)から成る。富士通研究所が開発。
- (注 4) M²BAR 法：エムスクエアードバー。複数の結合パターンを用いて高精度かつ高速化した定量的活性予測計算法。富士通研究所が開発。
- (注 5) 立体配座解析：化合物の立体形状と位置エネルギーの関係を調べること。

【 関連リンク 】

プレスリリース「東京大学 先端科学技術研究センターと富士通 世界に先駆けて実用化を目指す、新しい IT 創薬技術の共同研究を開始」(2011 年 6 月 10 日 発表済み)

<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2011/06/10.html>

プレスリリース「東京大学先端科学技術研究センター、富士通株式会社、興和株式会社 IT 創薬により、がんを標的とする新規活性化合物の創出に成功」(2014 年 8 月 7 日 発表済み)

<http://www.kowa.co.jp/news/2014/press140807.pdf>

【 報道関係者お問い合わせ先 】

東京大学 先端科学技術研究センター 広報・情報室 担当:村山

電話:03-5452-5424(直通)

富士通株式会社 広報 IR 室 担当:片桐、伊藤

電話:03-6252-2174(直通)

興和株式会社 広報部

電話:03-3279-7392(直通)

【 本件に関するお問い合わせ 】

富士通コンタクトライン(総合窓口)

電話 : 0120-933-200

受付時間:9時~17時30分(土曜日・日曜日・祝日・当社指定の休業日を除く)

興和株式会社 東京創薬研究所

電話:042-391-6212(直通)