

# バイオ関連企業の動向

## バイオグリッドセン ター関西

バイオグリッドセンタ  
ー関西（大阪府豊中市、  
下條真司理事長、06・  
6873・2156）は  
「創薬バリューチェイ  
ン」プロジェクト（代表  
士 坂田恒昭理事）を進め  
ている。同プロの提案  
を用いて、医薬品候補化  
合物の発見（探索）およ  
び創成事業に採択され  
た。コンピュータ技術  
を用いて、医薬品候補化  
合物の発見（探索）およ  
び創成事業に採択され  
た。コンピュータによる

「インシリコでの創薬手  
法の確立」こその実証研  
究」は文科省の大阪北部  
（彩都）地域的クラス  
ター創成事業に採択され  
た。コンピュータ技術  
を用いて、医薬品候補化  
合物の発見（探索）およ  
び創成事業に採択され  
た。

コンピュータによる

## 創薬バリューチェーン プロジェクトを進行

医薬品候補化合物探索の道探る

ユレーションはたんぱく  
質の構造情報が必要にな  
る。構造の動的な変動を  
正確にシミュレーション  
することは難しく、予測  
結果の信頼性、再現性な  
どに課題がある。特に膜  
たんぱく質は新薬開発の  
標的となるが、結晶化が  
難しく構造はほとんど分  
かっていない。このため  
構造が分からなくても、  
薬を作ることも求められ  
ている。

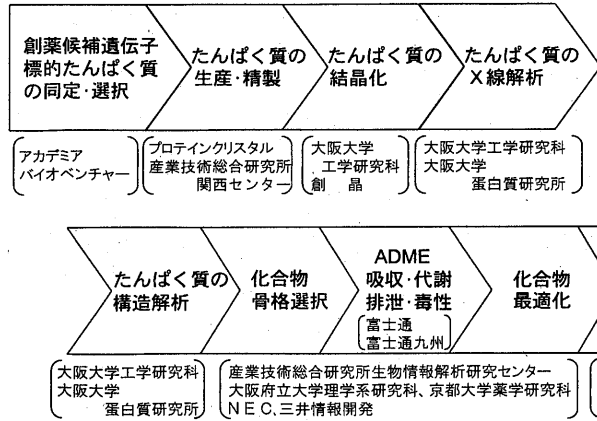
候補化合物の発見の取り  
組みとしては、京都大学  
大学院薬学研究所の奥野  
恭史助教が開発したコン  
ピューターを用いた構造  
未知のたんぱく質に対  
する薬剤候補化合物の探  
索手法「相互マシンラー  
ニング法」がある。  
熱力学的シミュレーシ  
ョンにより結合モードを  
探索するドッキングシミ

相互作用マシンラーニ  
ング法は化合物空間とた  
んぱく質空間を、それぞ  
れ類似性に基づいて定義  
する。既知の多対多の相  
互作用パターンを統計的  
にルール化し、相互作用  
ルールに最も近い化合物  
を算出、予測する。同法  
では標的たんぱく質の立  
体構造は不要。膜たんぱ  
く質の場合、一次配列の  
みでの高精度予測できる  
ことは検証済みだ。相互  
作用関係を優先し、化学  
構造の自由度を許容する  
ため、新規骨格の発見の  
可能性が高い。計算時間  
が短時間で済むという利  
点がある。

実験では構造が未知の  
膜たんぱく質を用いた。  
同法を用い論文などの既  
知化合物の情報を用い、  
計算機で解析し約1300  
の化合物を抽出、その化  
合物を購入して生物活性  
実験した。すると、既に  
論文で発表されている化

合物活性より1000倍  
の作用と10倍の作用を示  
す化合物を見つけた。1  
000倍の活性を示す化  
合物は、すでに薬として  
使えるナノモルオーダー  
の活性を有し、新薬開発  
に近づくことになる。ま  
た既知化合物と同等の活  
性を示す26個の化合物を  
探索することができてい  
る。

## 創薬バリューチェーンの概念



## 国際級クラスターの 形成でわが国をけん引