

新薬創出力強化のためのIT創薬及び天然物化学技術

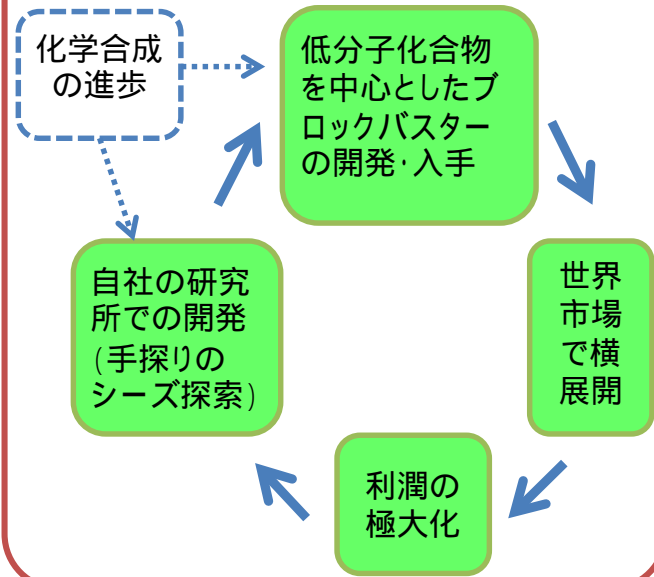
過去、化学合成に強みを持つ製薬メーカーは、多くのブロックバスターを産出し、売上高を伸ばしてきたが、1990年～2000年頃を境に新薬候補は出にくくなっており、大型新薬を狙ったブロックバスターモデルは綻び始めている。これは、低分子化合物を中心とした有効成分が探索され尽くしたこと、開発対象が患者数の多い疾患から患者数の少ない疾患へと移行したことが原因。

今後は、無効薬投与及び薬剤による副作用リスクを回避し、効果が期待できる患者に限定して処方する個別化医療的アプローチでの新薬開発に期待。

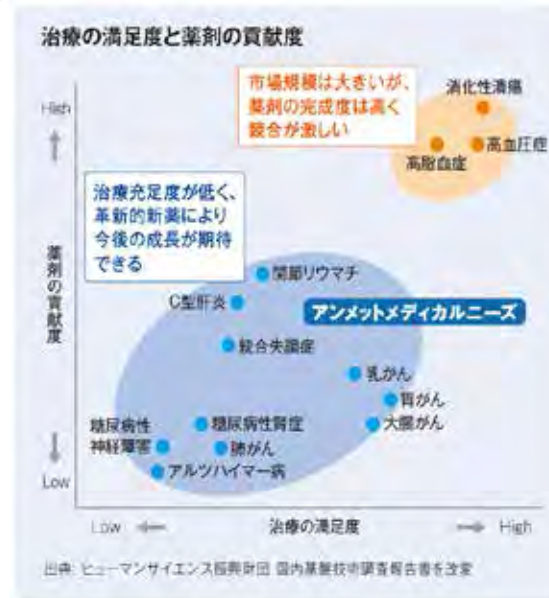
一方、近年、遺伝子が休眠していたり微生物を培養できない等の理由から、多くの未利用な天然化合物が存在することが明らかとなっている。

そこで、従来の手探り型の創薬手法による低分子化合物中心の開発モデルから脱却し、ITを活用した合理的な創薬手法により創薬コストの低減をはかるとともに、未利用天然化合物を活用する技術基盤を創出し、新薬創出力を強化する必要がある。

従来の世界の医薬品企業における成功ビジネスモデル

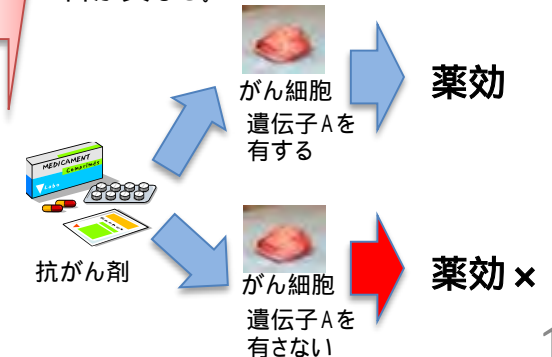


開発対象と個別化医療



がん・アルツハイマーなどは、医薬品が薬効を示す割合が低く、患者の体質（遺伝子タイプ）を踏まえた医薬品の開発（「**個別化医療**」）が必要。

患者の有する遺伝子タイプにより、がんの特徴が異なり、その結果、抗がん剤の効き目が異なる。



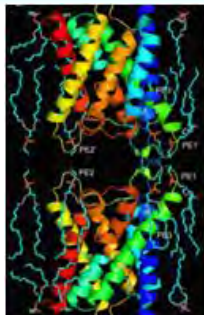
出典：中外製薬株式会社アニュアルレポート2010

ITを活用した革新的医薬品創出基盤技術開発

プロジェクトの目的

ITを活用することで、個別化医療・先制医療のための創薬プロセスを合理化する革新的な創薬基盤ツールを開発し、創薬コストの低減をはかるとともに、新薬創出力の強化する。

X線及び電子線による蛋白質及びその化合物複合体の精緻立体構造取得技術



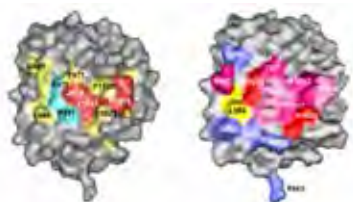
水チャネルの構造

電子顕微鏡を用いて創薬標的タンパク質の立体構造を明らかにする。

サンプルの調製技術

構造データ

核磁気共鳴法 (NMR)による蛋白質の生理的条件下における動的立体構造解析



NMRを用いて体内にあるときと近い状態の立体構造を明らかにする。

サンプルの調製技術

探索的実証研究

シミュレーションの結果、得られた化合物が実際に体の中で作用するか検証する。

シミュレーション結果

細胞/動物内での効果検証



革新的in silicoシミュレーション/スクリーニングソフトウェアの開発

コンピューター内で、取得した立体構造と化合物の結合をシミュレーションする。



高精度・高速モデリング・分子間相互作用シミュレーションと評価用コンピュータシステム(上)と相互作用モデル(下)

相互作用データ

