

2015年7月23日

アステラス製薬:国立研究開発法人産業技術総合研究所と 高度なIT創薬技術活用による共同研究を開始

**-約1万種類のタンパク質複合体構造情報と高度なIT創薬技術の融合により
眼科及び腎疾患領域において早期の化合物取得を目指す-**

アステラス製薬株式会社（本社：東京、代表取締役社長：畑中 好彦、以下「アステラス製薬」）は国立研究開発法人産業技術総合研究所（所在地：東京、理事長：中鉢 良治、以下「産総研」）と、アステラス製薬が保有するタンパク質複合体構造情報¹⁾と産総研が持つ高度なIT創薬技術を活用した共同研究を開始しましたのでお知らせします。

医薬品の候補となる化合物（以下「候補化合物」）は、病気の原因となるタンパク質に作用し、効果を発揮します。

アステラス製薬は、タンパク質と候補化合物との複合体結晶構造情報を豊富に蓄積しており、その数は約1万種類にのぼります。さらに、これら複合体構造に含まれる候補化合物は、薬として好まれる性質（ドラッグライクネス²⁾）の高い化合物となっています。

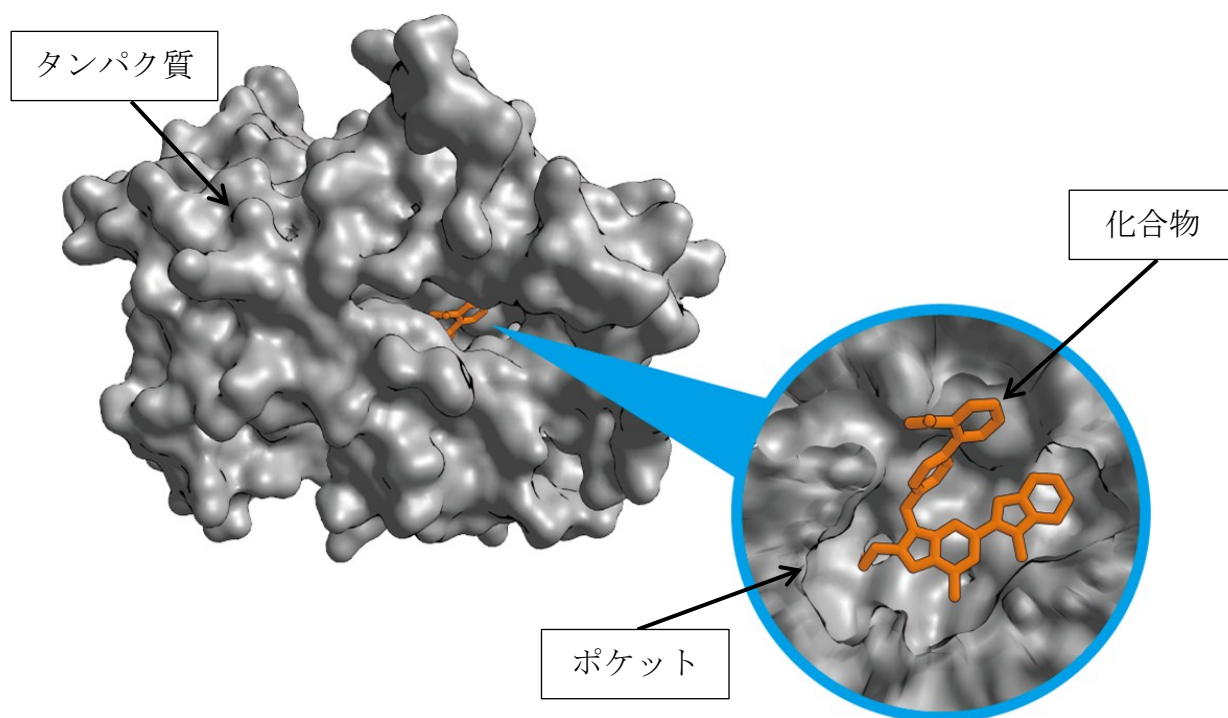
一方、産総研は、複合体構造を網羅的に解析するための技術・計算手法、さらにはタンパク質の機能発現に関わる構造の揺らぎ³⁾を解析する最先端のIT創薬技術を有しています。

本共同研究では、産総研の持つ高度なIT創薬技術とともに、アステラス製薬の創薬化学・計算化学・X線結晶学を専門とする研究者のノウハウを集結することにより、眼科及び腎疾患の2つの領域における創薬プロジェクトで早期の化合物取得を目指していきます。

アステラス製薬は、高い専門性を有する外部パートナーとの連携による創薬のオープンイノベーションを積極的に推進しています。本共同研究により、化合物探索の効率が大きく向上し、創薬機会が広がるものと期待しています。

以上

1) タンパク質複合体構造情報：タンパク質とそれに作用する化合物の組み合わせの3次元構造情報です。



<タンパク質複合体構造情報のイメージ>

2) ドラッグライクネス：化合物の構造から読み取られる「薬になりやすさ」のことです。ドラッグライクネスを表す指標として、QED（quantitative estimate of drug-likeness）やLipinskiのRule of Fiveが広く知られています。

3) 構造の揺らぎ：生体内でのタンパク質は、時間経過とともにその構造が揺らぐことによって、タンパク質の機能を発揮しています。X線結晶構造解析で得られたタンパク質の静的な構造を用いて、分子シミュレーションを実施することによって、タンパク質の構造変化を捉えることができます。

アステラス製薬株式会社について

アステラス製薬株式会社 (<http://www.astellas.com/jp/>) は、東京に本社を置き、「先端・信頼の医薬で、世界の人々の健康に貢献する」ことを経営理念に掲げる製薬企業です。既存の重点疾患領域である泌尿器、がん、免疫科学、腎疾患、神経科学に加えて、新たな疾患領域への参入や新技術・新治療手段を活用した創薬研究にも取り組んでいます。さらには各種医療・ヘルスケア事業との融合による新たな価値創出にも挑戦しています。アステラス製薬は、変化する医療の最先端に立ち、科学の進歩を患者さんの価値に変えていきます。

お問い合わせ先

アステラス製薬株式会社

広報部

TEL:03-3244-3201 FAX:03-5201-7473