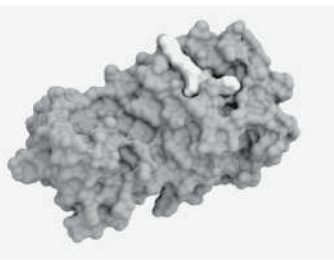


コロナ治療薬AI探索

PFN・京都薬大 ウイルス増殖酵素阻害

プリファード・ネットワークス（PFN、東京都千代田区、西川徹社長）と京都薬科大学の赤路健一副学長らは6日、人工知能（AI）技術を用いて新型コロナウイルス感染症の治療薬候補物質を見つけたと発表した。AI技術で新型コロナウイルスの増殖に必要な酵素「プロテアーゼ」



の阻害物質を探索し、合成すると阻害作用が確認できた。今後はAIを活用して創薬に取

プロテアーゼに白の薬剤が結合して増殖を阻害（イメージ||PFN提供）

り組むパートナー企業を募集し、実用化研究を加速させる。

プロテアーゼ「Mpro」を対象に阻害物質を探索した。化合物の生成AIと自動最適化技術を組み合わせ、従来の化合物ライブラリーにない物質も高速で探索できる。

PFNのシステムが

提案した化合物の中から13化合物を実際に合成したところ、7化合物で新型コロナウイルスのMproの阻害活性を示した。治療薬候補物質として有力だという。Mproはヒトに似た酵素が認められていないため、激しい副作用は少ないと期待される。Mproの阻害剤はペプチド化合物が多かった。生体内ではペプチド部分が分解されやすく、ペプチドと同じ構造を持った化合物に置き換えられると薬効が高くなる可能性がある。こうした探索にもAI探索の手法は向くとしている。