

ぶらっと ラボ

コロナ薬開発 AIが相棒



たんぱく質の立体構造を調べる＝京都薬科大提供

新型コロナウイルスの治療薬開発ができないか――。

感染拡大が始まった昨年、京都薬科大（京都市）の赤路健一副学長は考えた。2002～03年に中国を中心に流行した重症急性呼吸器症候群（SARS）の薬開発に取り組んだ蓄積がある。新型コロナウイルスはSARSを起すウイルスとよく似ている。SARSの時は、ウイルス増殖に不可欠な酵素に注目、

その働きを邪魔する薬の候補物質を見つけて最初の論文発表まで4～5年かかった。

今回も同じ酵素に狙いをつけなければよいとわかっていたが、他の研究者も同じことを考えるだろう。時間との勝負だ。どうすればよいか考えていた時、薬の候補物質をAI技術で探索する会社があると知った。プリファードネットワークス（東京都）と共同研究を始めることにした。すでにわかっていた酵素の立体構造をもとに、その働きを邪魔する化合物の候補をA

Iがはじき出す。共同で化合物設計の方針を決めてから、わずか2～3カ月で多数の候補が示された。

圧倒的な速さに「すごい」と赤路さんは思った。しかし、化学構造を見ると「これは薬にならへん」「これはすぐ合成できない」と長年の経験からくるカンが働いた。AIとの共同作業で選び出した13の物質を研究室で合成。効果の評価に使う新型コロナウイルスの酵素は、前回の工夫をいかしてすぐに作れた。酵素と混ぜて、実際にその働きを

邪魔できるかどうかを確かめた。そのうち一つは、酵素を邪魔する効果が高かった。

この物質は創薬の出発点で「リード化合物」と呼ばれる。これをもとに化学構造を少しずつ変えて、効果が高く、安全に使える薬にできそうな物質を探していく。すでに開発が進んだ段階にある新型コロナウイルス治療薬は複数ある。ただ、赤路さんは研究をさらに進めていきたいという。「インフルエンザの薬も複数ある。選択肢は多いほうがいい」（瀬川茂子）