

コロナ薬候補を発見

AI創薬で探索に成功

京都薬大

京都薬科大学の
赤路健一教授らの
研究グループは、
新型コロナウイルス
感染症の治療薬
候補となるリード化合物を
発見した。プリファード
ネットワークス(PFN)
との共同研究による成果
で、人工知能(AI)を活
用し化合物探索にかかる期
間を大幅に短くすることに
成功した。

PFNが持つAI創薬技
術を活用して、新型コロナ
ウイルスの増殖に関わるメ
インプロテアーゼの活性を
阻害する化合物を探索。仮
想空間上で化合物の分子設
計と分子モデリングを実施

し、13化合物を見出した。
これらの化合物を京都薬大
で合成して評価したところ、
七つの化合物でメイン
プロテアーゼの活性を阻害
する作用が認められた。

京都薬大はこれまでに重
症呼吸器症候群(SARS)
原因ウイルスの増殖に
関わる酵素を阻害する化
物の創製に成功しており、
その基礎研究の成果をPFN
のプラットフォームと融
合させた。