

○ 日本医科大学との共同研究

「生成AI・MDシミュレーション・レアイベント解析による人工抗体設計の新戦略」

(薬品物理化学研究室 山下 雄史 准教授)

(概要)

本共同研究は、AI技術とMDシミュレーションを駆使したタンパク質設計とレアイベント解析を組み合わせることで、効率的な抗体ミメティクス開発法を確立しようとするものである。具体的には、第一段階としてAI設計技術とMDシミュレーションを用いて人工抗体の候補を作製し、第二段階として詳細なレアイベント解析を行う。この二段階アプローチにより、静的構造では評価しきれない結合親和性や安定性を動的に検証し、最適化につなげる。得られた人工抗体は、ドラッグデリバリーシステム「Cupid-Psyche」に結合させることで、即座に医薬品開発へと展開できる可能性が高く、がんや難治性疾患の新規治療法開発を加速させると期待される。