



CBI学会2020大会

—「科学実験の自動化が拓くAI時代の創薬研究」—

BINDS シンポジウムSP-02

『COVID-19感染症治療薬創製のための AMED-BINDSの取り組み』

モデレーター

善光 龍哉 (AMED : 国立研究開発法人日本医療研究開発機構)

演題・講師

COVID-19 対策の創薬開発へ向けた北大創薬科学研究教育センターの取り組み
前仲 勝実(北海道大学大学院薬学研究院)

相互作用の熱力学的解析とCOVID-19

津本 浩平(東京大学大学院工学研究科・医科学研究所)

ドラッグリポジショニングを活用したCOVID-19 治療薬のインシリコ創薬支援
広川 貴次(産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門)

新型コロナウイルス感染実験からの増殖阻害薬の同定

渡士 幸一(国立感染症研究所 ウイルス第二部)

日時

2020年10月27日(火)
14:45~16:15

チャンネル

3

お問い合わせ先



国立研究開発法人 日本医療研究開発機構 (AMED) 創薬事業部 医薬品研究開発課

〒100-0004 東京都千代田区大手町1-7-1 読売新聞ビル 22階

TEL : 03-6870-2219 FAX : 03-6870-2244

E-mail : 20-DDLSG-16@amed.go.jp URL : <https://www.amed.go.jp/>

開催趣旨

2019年12月に中国武漢において世界で最初に見出された新型コロナウイルス感染症（COVID-19）は、瞬く間に世界中に広がり、猛威を振るってきた。日本国内においては、4月から5月の緊急事態宣言発令により感染拡大から順調に収束に向かっていると見られたのも束の間、7月からはまた感染が拡大する方向になっている。

このような状況の中、国立研究開発法人日本医療研究開発機構（AMED）所管の創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業（BINDS）では、優れたライフサイエンス研究の成果を医薬品等の実用化に繋げるといった事業目的に沿って、COVID-19の治療薬探索に、これまで培ってきたプラットフォームや技術を活かすべく積極的に取り組んできている。

本シンポジウムでは、AMED-BINDS関係の4名の先生方に COVID-19 の治療薬探索に向けたご研究の成果を発表していただき、今後の治療薬・ワクチン研究開発の進め方等について議論する場としたい。

講演要旨

COVID-19 対策の創薬開発へ向けた北大創薬科学研究教育センターの取り組み 前仲 勝実(北海道大学大学院薬学研究院)

1

北大薬学研究院創薬科学研究教育センターでは、既存薬およびオリジナル化合物ライブラリーを整備し、化合物スクリーニング・構造生物学・蛋白質科学を中心にシームレスにつながることのできる統合的な創薬開発体制を構築してきた。COVID-19 の緊急事態においては、その基盤を活かして日本承認既存薬を網羅した化合物ライブラリーを迅速に国立感染症研究所に供与することができた。さらに、抗ウイルス薬開発で以前から共同研究を実施していた北大人獣共通感染症リサーチセンターとの連携によりSARS-CoV-2を用いたウイルス感染実験も早期に実施できており、国立感染症研究所および BINDSのネットワークと協働して複数の化合物において阻害活性を見出している。本講演では、これまでの治療薬開発に向けた取り組みの状況に加え、今後の本創薬拠点の展開について触れたい。

相互作用の熱力学的解析とCOVID-19

津本 浩平(東京大学大学院工学研究科・医科学研究所)

2

低分子治療薬開発研究において、特にヒット化合物の精査と最適化に熱力学的解析が威力を発揮している。また、熱力学情報は、特にドラッグリポジショニング、既存薬の適用拡大にも有益な情報を与えることが期待される。一方、抗体等高分子医薬品開発においても、熱力学情報が抗原特異性・親和性に関して重要な指標となっている。本発表では、COVID-19に関連した標的分子に対して、主にドラッグリポジショニングの観点から選択された化合物群との熱力学的解析について得られている結果を紹介する。立体構造情報に基づいてまとめ、現状と今後を議論する予定である。

ドラッグリポジショニングを活用したCOVID-19 治療薬のインシリコ創薬支援

広川 貴次(産業技術総合研究所 細胞分子工学研究部門)

3

ドラッグリポジショニングによる新型コロナウイルス治療薬の開発は、速やかな臨床試験が期待されている。本発表では、国立感染症研究所等と協力して、約8,000種の既存承認薬に対し、ウイルス由来のメインプロテアーゼの立体構造に基づいたドッキングスコアと相互作用フィンガープリント法によるインシリコスクリーニングを実施した。その結果、新型コロナウイルス治療薬の候補の1つとして抗エイズウイルス（HIV）薬ネルフィナビルを同定した。本発表では、ネルフィナビルに加え、作用メカニズムの異なる白血球減少症治療薬セファランチンや駆虫薬イベルメクチンなどの既存薬についてもドッキング計算による作用機序解析状況についても紹介する。

新型コロナウイルス感染実験からの増殖阻害薬の同定

渡士 幸一(国立感染症研究所 ウイルス第二部)

4

私たちは主に、新型コロナウイルス（SARS-CoV-2）の培養細胞への感染実験を利用したウェット方面より増殖阻害薬を同定してきた。また AMED-BINDS の先生方との共同研究での *in silico*、*in vitro* データにウイルス学的解析を加えて化合物の作用機序を解析し、多剤併用の組み合わせを最適化してきた。本発表ではウイルス学だけでなく、生化学、薬学、情報科学、数学、臨床医学など多分野にわたる共同研究の枠組みで、どのように抗 SARS-CoV-2 治療薬候補同定を効率化し、即時対応に活かしてきたかを紹介する。今後進めていくべき研究や方向性、また共同研究のあり方についても言及する。