

# スパコンと化学合成技術を融合 東工大と川崎市が共同で 中分子IIT創薬研究拠点設立

東京工業大学（三島良直学長）と川崎市（福田紀彦市長）は共同で、スーパーコンピュータと化学合成技術を融合した世界初となる「中分子IIT創薬研究拠点（MIDL: Middle Molecule IIT-based Drug Discovery Laboratory）」を川崎市の殿町国際戦略拠点であるキングスカイフロント（神奈川県川崎市川崎区殿町3-25-12）に設置すると発表した。現在、内装工事等の準備を行っており、来年には稼働するという。

同研究拠点には数名の研究者が常駐し、他大学や企業との共同研究が行われるという。東工大の情報理工学や生命理工学の知見を活用して、人工ペプチド・人工核酸合成技術などを融合した革新的な中分子創薬研究を展開。計算機環境を整備するほか、スーパーコンピュータ「TUBAME3・0」に接続して分子シミュレーションや機械学習技術を用いた中分子の体内持続性や細胞膜透過性などの予測や評価を行うという。

川崎市内の企業をはじめ、キングスカイフロントの立地を活かして国内外の企業、大学と産学官連携により、基礎・基盤研究と創薬事業を橋渡しするイノベーション・エコシステムを形成し、効率的な中分子創薬の開発を目指す。中分子はペプチドや核酸など分子量が500〜3万程度の分子で、化学合成可能でありながら化学合成不可能な高分子と似た利点を有し、新たな創薬ターゲットとして期待されている。キングスカイフロントは羽田空港から車で10分の川崎市殿町地区、京浜工業地帯の中心に立地している。

文部科学省の平成29年度地域イノベーション・エコシステム形成プログラムに、両者の共同提案による研究開発プログラム「IIT創薬技術と化学合成技術の融合による革新的な中分子創約フローの事業化」が採択されたことで実現した。支援期間は平成34年3月までの5年間で、年1億5500万円が支援される。

同拠点は、秋山泰教授（情報工学院）を研究代表者とする東工大の部局を超えた研究組織であるイノベーション研究推進体「中分子IIT創薬研究推進体」の代表拠点として機能する。大型の装置等は同大学すくなくかけ台キャンパス内に新たに開設する研究室に設置し、同拠点に参集できない研究者も研究できるようにするという。

秋山教授らは3年ほど前から川崎市のベンチャー企業ペプチドリームと共同研究を実施しており、それを契機に同市に拠点を形成していた慶應義塾大学医学部とも共同研究を開始。その過程で川崎市自治体や同市企業などと関係性を深め、また立地の優位性などを確認し、拠点の設置を決定したという。

## ◇秋山教授の話

IIT技術は失敗確率の少ない創薬を切り拓くと確信しています。一方で、中分子は従来の低分子とは性質が異なることからコンピュータ予測はまだ難しいテーマと考えられています。創薬化学者、合成化学者、情報科学者さらにはスパコンやクラウドの技術者が結果すること、期待されている中分子創薬を加速できると思っています。また殿町では周辺分野の研究者と多くの出会いがあると期待しています。