

2022年8月8日
各位

蛋白質間相互作用を標的とした創薬研究に関する
共同研究契約締結のお知らせ

インタープロテイン株式会社（代表取締役社長：細田 雅人、本社：大阪市北区、以下、インタープロテイン）は、新薬の創出を目指し、特定の蛋白質間相互作用（注）を標的とした創薬研究に関する共同研究契約を株式会社三和化学研究所（代表取締役社長：磯野 修作、本社：愛知県名古屋市中区、以下、三和化学）と締結しましたのでお知らせいたします。

両社は今後、三和化学の創薬研究に関する独自の技術ノウハウとインタープロテインの蛋白質間相互作用阻害分子のスクリーニングに関する独自の技術とを合わせ、新薬創出に共同で取り組みます。

（注）蛋白質間相互作用（protein-protein interaction、PPI）とは、二つ以上の蛋白質分子が結合することによって起こる生物学的反応の総称です。例えば、サイトカインがサイトカイン受容体に結合し、そのサイトカイン受容体から何らかの細胞内シグナルが伝達されるような反応を指します。このように、蛋白質間相互作用は多くの疾患において重要な役割を果たしています。

インタープロテインについて

インタープロテインは、二つの基盤技術「**INTerprotein's Engine for New Drug Design (INTENDD®)**」/「**AI-guided INTENDD®**」および「**helix-loop-helix peptide (HLHP; 新規の基本構造を有する治療用ペプチド)**」を用いて、蛋白質間相互作用 (PPI) やユビキチン-プロテアソーム系などのチャレンジングな創薬標的に対する創薬研究を行っています。これらの技術を活用することにより、インタープロテインは、広範囲の創薬標的に対する低分子またはペプチド阻害薬の同定を進めています。

INTENDD®/AI-guided INTENDD®について

INTENDD®は、低分子の structure-based drug discovery (SBDD) のための革新的な戦略であり、良好な低分子結合部位の同定と活性化合物選定のためのアルゴリズム (標的ごとに構築) である **Structure-Based Scaffold Generation (SBSG)** 法を用いた *in-silico* スクリーニングから構成されます。INTENDD®は、ドッキングシミュレーションや分子動力学 (MD) に基づくアプローチとは異なる「**結合メカニズム**」に基づく化合物選定によって、新規骨格を有する高活性化合物を高いヒット率で同定することを可能にします。AI-guided INTENDD®は、人工知能 (AI) を導入した低分子の活性予測システムであり、INTENDD®のノウハウも活用しています。AI-guided INTENDD®は次のような利点を有しています: 1) 純粹に structure-based である (活性化合物に関する情報を必要としない)、2) 深層学習に立体的原子座標を使用する、3) PPI 阻害薬の活性予測に適している、4) 結合自由エネルギーとしてのエンタルピーとエントロピーのバランスのよい化合物の活性予測が可能である、5) 活性を 8 クラスの分類することが可能である。INTENDD®および AI-guided INTENDD®は、それぞれ主にヒット同定およびリード創製/最適化に使用することが想定されています。

本件に関するお問い合わせ

インタープロテイン株式会社
E-mail : info@interprotein.com