

希少構造を標的とする知財戦略： AlphaFoldを超えるAI創薬プラットフォーム

～IT(IBMET: 逆探索法) と 構造生物学 の融合～

研究代表者：大阪大学大学院薬学研究科 教授 井上豪

アカデミア

新規モダリ
ティー創薬

AI標的探索

エpitope
・構造解析

遺伝子
巨大情報
ライブラリ

データ
サーバ

プログラ
ミング

創薬
シーズ
(抗体医薬)

クライオ 電顕
FIB-SEM
病理組織解析

BIO team

AWSなど

IT team

九大・産総研

東大・阪大



dotAqua

(例) トリプルネガティブ乳がんを実証研究 → 他のアンメットメディカルニーズの高い癌でも実施

疾患細胞

情報変換

希少抗体の情報

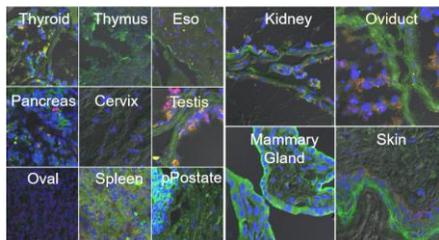
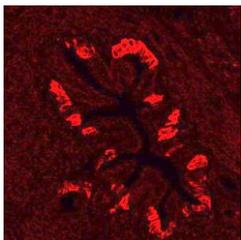


Cluster111	-0.12	-0.62	0.27	0.00	0.44	0.00	0.00
Cluster103	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.00	0.00
Cluster138	-0.67	0.00	0.00	0.00	0.62	0.00	-0.33
Cluster175	0.00	-0.55	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.38
Cluster204	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.33
Cluster206	-0.67	0.00	-0.62	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster201	0.00	-0.56	0.01	-0.62	0.00	0.00	0.00
Cluster209	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster276	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster306	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster453	0.00	0.00	0.00	-0.48	-0.68	0.00	0.00
Cluster512	0.00	0.00	-0.62	-0.48	-0.68	0.00	0.00
Cluster118	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster166	0.00	0.00	-0.62	0.00	0.00	0.00	0.00
Cluster275	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

AI解析

VHH89の取得

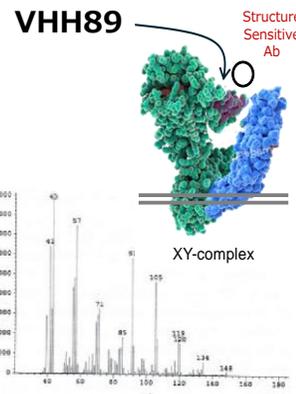
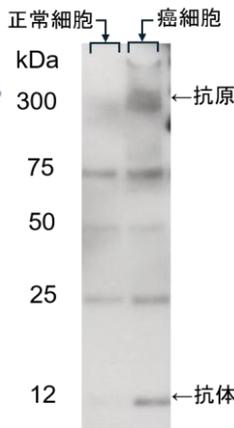
正常ヒト組織アレイで確認



標的分子の詳細な解析

- 免疫沈降
- 質量分析

- X線解析
- クライオEM



ADC創薬でPOC確立

- 抗体薬物複合体の作製
- 動物モデルで薬効確認

Xenograft model

