

## インテージヘルスケア、Space BD との AI 創薬に関する共同研究でタンパク質実験サンプルの ISS への打上げ完了

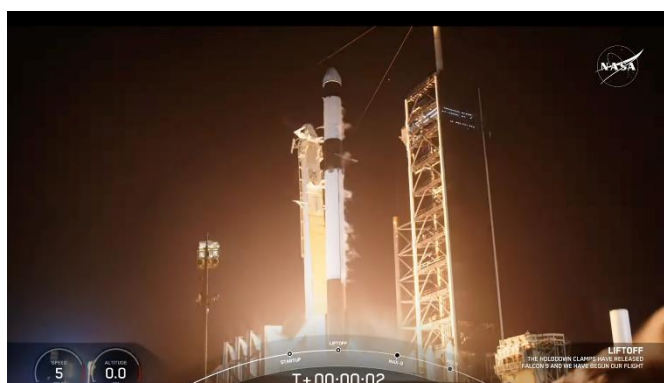


株式会社インテージヘルスケア（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：村井啓太）は、Space BD 株式会社（本社：東京都中央区、代表取締役社長：永崎将利）との AI 創薬に関連する共同研究にて、タンパク質実験サンプルの国際宇宙ステーション（以下 ISS）「きぼう」への打上げが 2024 年 11 月 5 日（火）11 時 29 分（日本標準時）に完了したことをお知らせいたします。

実験サンプルは年内を目途に地上に帰還後、宇宙の微小重力環境で結晶化したタンパク質の構造解析を行い、AI による薬剤設計の技術検証を実施する予定です。



左：ISSに打上げられたタンパク質実験サンプル



右：打上げの様子（写真＝NASA）

打上げの詳細につきましては、下記 Space BD のウェブサイトをご覧ください。

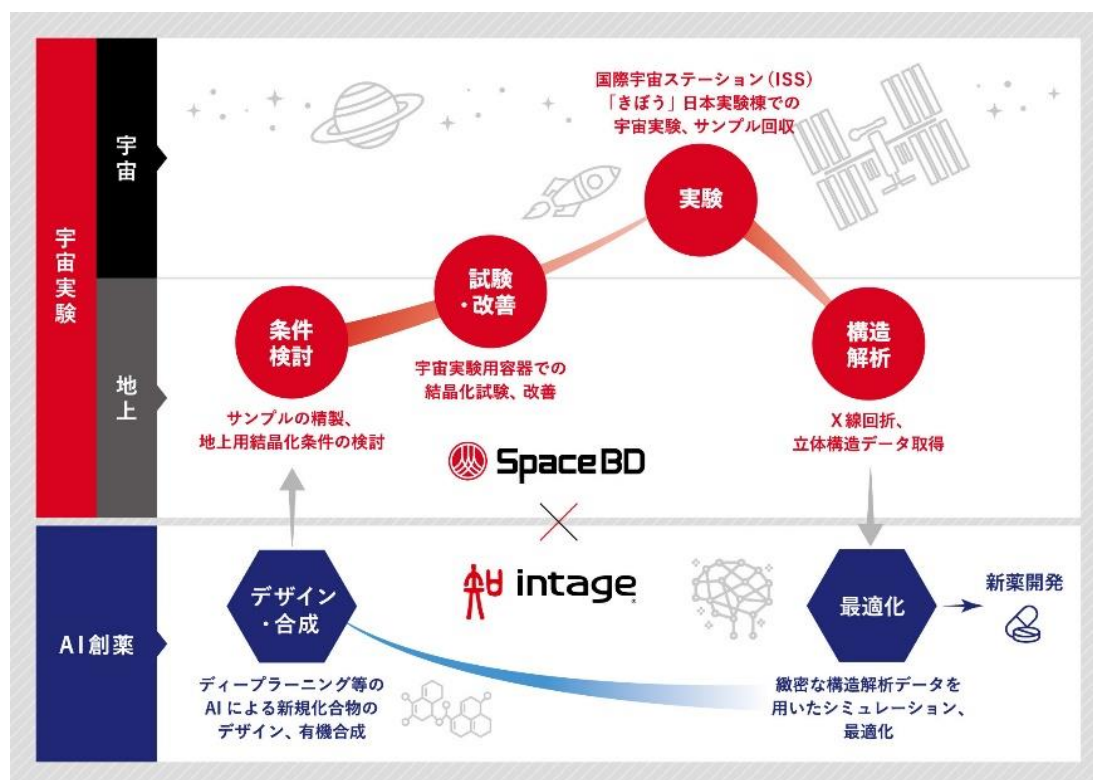
(<https://space-bd.com/release/3102/>)

## 【AI創薬×宇宙実験の取り組みについて】

インテージヘルスケアと Space BD は、各社がサービス提供する新薬創出のための AI 創薬プラットフォーム「Deep Quartet（ディープカルテット）」と、宇宙特有の微小重力環境を活用した「高品質タンパク質結晶構造解析サービス」を連携させた創薬研究支援サービスの提供を視野に共同研究を行っています。

ISS「きぼう」日本実験棟では、宇宙特有の微小重力環境を活用して、高品質なタンパク質結晶を生成し、地上実験では得られない緻密な構造情報を取得できます。この超精密な構造情報と AI 創薬の技術を用いて、薬物設計において重要とされる「弱い分子間力<sup>※1</sup>」をも考慮した化合物の最適化技術の開発を行います。本共同研究の成果は、創薬研究における開発コストと期間の効率化に貢献します。

※1：医薬品の分子設計において、標的タンパクに対して分子（化合物）が強い結合を持つことは必須とされるが、近年のリード化合物の最適化研究においては、CH- $\pi$ 相互作用（分子内で炭素-水素（C-H）結合と芳香族環（ $\pi$ 系）との間に生じる非共有結合性の相互作用）など、特定の弱い分子間力が重要な役割を果たしていると考えられている



【AI創薬プラットフォーム「Deep Quartet」と「宇宙実験・高品質タンパク質結晶生成サービス」の連携図】

## 【「Deep Quartet（ディープカルテット）」について】

株式会社インテージヘルスケアと株式会社理論創薬研究所、株式会社アフィニティサイエンスが3社連携で開発・提供する AI 創薬プラットフォーム。「Deep Quartet」は、深層強化学習の技術である(1)Deep reinforcement learning、ファーマコフォアモデルを用いるソフトウェア(2)LigandScout、網羅的なターゲット予測を可能とする機械学習ベースの技術(3)CzeekS を組み合わせた一連のフローであり、ここに(4)メディシナルケミスト（有機合成化学者）の知見を加えることで、Quartet（四重奏）による AI 創薬プラットフォームを実現しています。

【株式会社インテージヘルスケア】 <https://www.intage-healthcare.co.jp/>

株式会社インテージヘルスケアは、医療・ヘルスケア領域のマーケティングリサーチとデータサイエンスサービスをコアビジネスと位置付けています。インテージグループのヘルスケア領域を担う各社<sup>※</sup>と一体となり、データ分析・活用によるソリューションを提供。ヘルスケア領域のあらゆる課題に対して、「医療消費者」起点のデータの価値化による、最適な意思決定をサポートしていきます。

<sup>※</sup> 株式会社協和企画、株式会社インテージリアルワールド、株式会社プラメド、Plamed Korea Co., Ltd.

【本件に関するお問い合わせ先】

株式会社インテージヘルスケア

マーケティング&バリューインサイト事業部

バリュー & アクセス部 創薬支援グループ：村上（むらかみ）

広報担当：深谷（ふかや）

TEL: 03-5294-8393（代）

E-mail : pr-ihc@intage.com