

# News Release

2023年1月11日  
株式会社日立ハイテク

## 慶應義塾大学と「Chemicals Informatics」を活用した創薬研究を開始

—低分子薬の開発をマテリアルズ・インフォマティクス技術で加速—

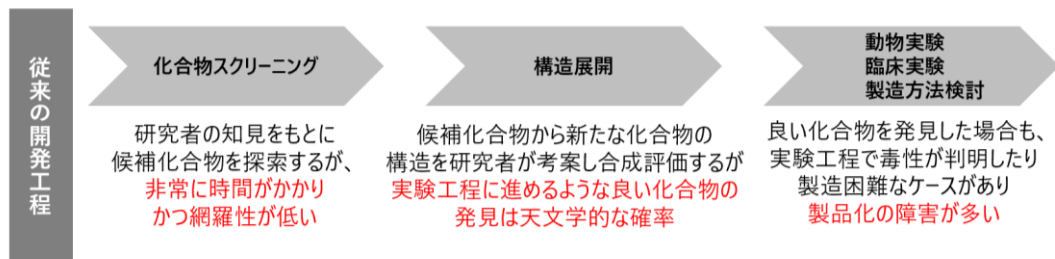
株式会社日立ハイテクソリューションズ(以下、日立ハイテクソリューションズ)は、慶應義塾大学薬学部とマテリアルズ・インフォマティクス(以下、MI)の活用による低分子薬<sup>\*1</sup>開発の効率化に向けた共同研究(以下、本研究)を開始します。

日立ハイテクソリューションズは、開発した MI ツールの Chemicals Informatics(以下、CI)を、従来の化学・素材分野における材料開発だけでなく、創薬分野にも活用していくことで、医療の質向上、および人々の QoL(Quality of Life)向上に貢献していきます。

\*1 低分子薬：非常に小さい分子で、細胞内に入りやすい性質をもつ薬剤の一種。

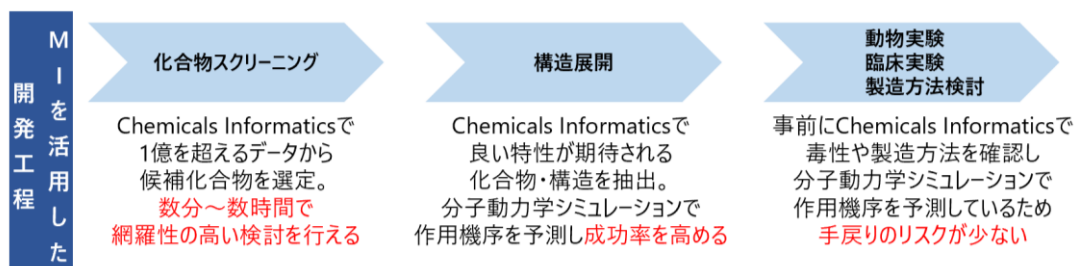
### ●従来の低分子薬開発における課題

研究開発に10年以上の歳月と莫大な費用がかかる一方で、成功率が非常に低い



### ●低分子薬開発にMIを活用することで期待される効果

研究開発のプロセス効率化と期間短縮、成功率向上により、**新薬開発と早期実用化を促進**



### ■本研究の背景

低分子薬は現代における主流の医薬品で、近年はがんの原因となるたんぱく質の作用を阻害する分子標的薬<sup>\*2</sup>としてなど、その用途拡大への期待が高まっています。従来、低分子薬の開発は、大量の既存化合物を収録する化合物ライブラリーの中から、研究者の知見や経験などに基き候補化合物を複数選定し、実験を繰り返すことで化合物構造の調整や作用機序の解明を行い、臨床試験へと進むプロセスをとってきました。そのため、研究開発には10年以上の歳月と莫大な費用がかかる一方で、成功率は非常に低いという課題がありました。このような課題の解決策として期待されているのが、AIなどの情報科学の手法により化合物・材料開発を高効率化する技術である MI です。

## ■ 本研究の概要

本研究では、慶應義塾大学薬学部による活性硫黄分子の産生酵素に対する選択的阻害剤の新薬開発研究において、日立ハイテックスソリューションズの CI を活用します。活性硫黄分子が細胞内で大量に産生されることで抗酸化作用や蛋白質の活性制御、エネルギー産生などを示すことが知られています。その産生酵素の働きを阻害する低分子薬を開発することで、生命現象の解明やがんなどの疾病の治療へとつながることが期待されます。本研究では、CI に収録される膨大な化合物データをもとに有望な化合物や構造の候補を AI で高速かつ網羅的に探索、その効果や仕組みに関する作用機序を分子動力学シミュレーションで予測します。これにより、低分子薬開発のプロセス効率化と期間短縮、成功率向上を支援し、新薬の開発と早期実用化に貢献します。

本研究を通して、日立ハイテックグループは、これまで化学・素材産業においてさまざまな材料の開発に貢献してきた CI の医薬品開発への適用を実証し、新薬開発への取り組みに寄与することで、社会への価値創出に向けた最適なソリューションを提供するとともに、人々の QoL 向上に貢献していきます。

\*2 分子標的薬：病気の原因となる特定の分子のみに作用するように設計された治療薬。

## ■ 関連情報

<https://www.hitachi-hightech.com/jp/ja/products/ict-solution/randd/ci/>

## ■ 日立ハイテックについて

日立ハイテックは、2001 年、株式会社日立製作所 計測器グループ、同半導体製造装置グループと、先端産業分野における専門商社である日製産業株式会社が統合し、誕生しました。2020 年、日立製作所の完全子会社となり連携を強化していくことで、社会課題の解決に貢献し、持続可能な社会の実現をめざしています。

医用分析装置、バイオ関連製品、分析機器、半導体製造装置、解析装置の製造・販売に加え、社会・産業インフラ、モビリティなどの分野における高付加価値ソリューションの提供を通して、グローバルな事業展開を行っています(2022 年 3 月期日立ハイテックグループ連結売上収益は 5,768 億円)。

詳しくは、日立ハイテックのウェブサイト(<https://www.hitachi-hightech.com/jp/>)をご覧ください。

## ■ 本件のお問い合わせ先

株式会社日立ハイテックスソリューションズ 経営戦略本部 DX マーケティング部 [担当：黒川、堀内]

〒105-6412 東京都港区虎ノ門一丁目 17 番 1 号虎ノ門ヒルズ ビジネスタワー

Mail：[hsl\\_marketing.dg@hitachi-hightech.com](mailto:hsl_marketing.dg@hitachi-hightech.com)

以上

---

このニュースリリース記載の情報(製品価格、製品仕様、サービスの内容、発売日、お問い合わせ先、URL 等)は、発表日現在の情報です。予告なしに変更され、検索日と情報が異なる可能性もありますので、あらかじめご了承ください。

---