

課題名：新薬創出を加速化するインシリコ創薬基盤の確立

氏名：奥野恭史

機関名：京都大学

1. 研究の背景

近年、製薬業界では新薬の承認数が低迷し続けているという深刻な問題を抱えており、新しい医薬品を効率的に作る事が非常に重要な課題となっています。しかしながら、医薬品候補となる化合物(化学物質)の化学構造には無限のバラエティーがあることから、全ての化合物を人間の手で生成して、その薬効を確認することは不可能であり、医薬品候補化合物を効率的に創製するための根本的な解決策は未だ得られておりません。

2. 研究の目標

そこで本研究では、コンピューターを用いて、病気の原因タンパク質に作用する新しい医薬品候補化合物の分子デザインを自動に行う計算手法(プログラム)の開発を目指します。

3. 研究の特色

具体的には、人工知能技術などの最新のIT技術を用いることで、これまで不可能であった無限の化合物のバラエティーから医薬品候補化合物を高精度にデザイン(予測)することを実現し、新しい医薬品候補化合物を高効率に創製する技術基盤の確立を図ります。

4. 将来的に期待される効果や応用分野

本研究で開発する計算手法を用いることで、医薬品開発の劇的スピードアップが可能となり、結果として新薬を求める患者全体への医療貢献と製薬産業界への経済貢献が期待されます。

ライフイノベーションの成長戦略「日本発の革新的な医薬品の研究開発推進」の実現
「新薬を求める患者への医療貢献」「製薬産業界への経済貢献」

「新薬創出の加速化」「医薬品開発効率の劇的向上」「創薬力の底上げ」

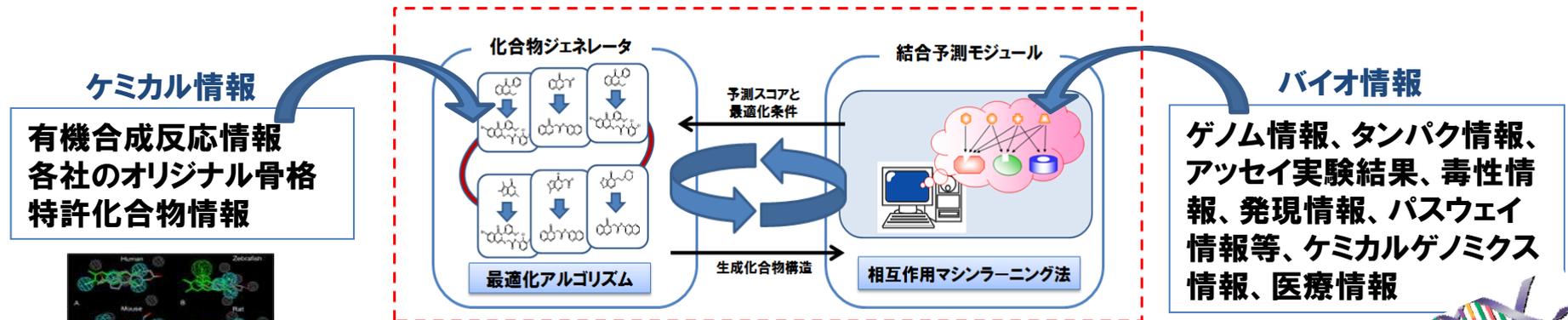
研究成果の実用化:

日本発の画期的ドラッグデザイン計算ソフトとして世界に発信



本研究目標:

人工知能技術などの最新のIT技術を用いることで、これまで不可能であった無限の化合物のバラエティーから医薬品候補化合物の分子デザインを自動に行う計算手法(プログラム)を開発



世界を先導する次世代インシリコ創薬技術の基盤

