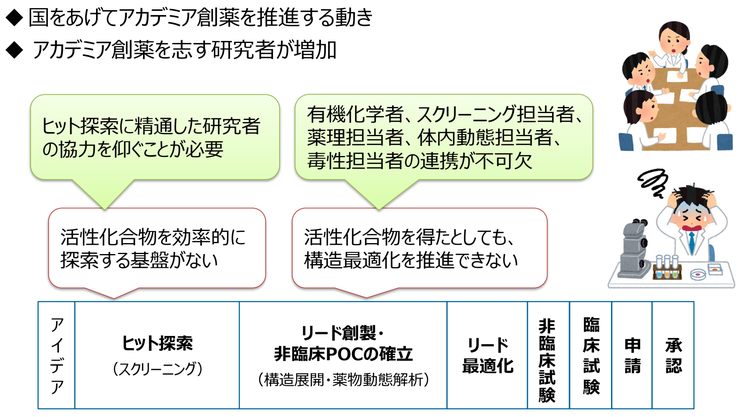
連携・融合ユニット

補助事業代表者（所属・職名）
小島　宏建（東京大学大学院薬学系研究科・特任教授）

概要

アカデミア創薬の課題

◆ 国をあげてアカデミア創薬を推進する動き
◆ アカデミア創薬を志す研究者が増加



あなたのラボから薬を生み出すアカデミア創薬の実践(羊土社）より改変

1）ヒット（化合物）： *in vitro*で標的分子と特異的に相互作用し、構造展開の余地がある化合物
2）リード（化合物）： *in vivo*で薬理活性を示し、物性・薬物動態・安全性等の課題を把握済みで構造展開により医薬品候補化合物が得られる可能性が高い化合物
3）非臨床POC（Proof of Concept）： 創薬のコンセプトに合致する作用を持つ化合物等を用いた治療効果の実証

構造展開ユニットのミッション

アカデミア創薬シーズの医薬品等としての実用化に向けて

➢ **製薬企業の創薬ノウハウ**をベースにした**リード創製**
- ヒット化合物からのリード化合物創出

➢ **非臨床POC**の確立
- 疾患モデル動物等での有効性 ＋ 薬物動態学的裏付け

➢ **企業への導出**
➢ **より高次の医薬品創出支援事業への採択**

*スクリーニングなどから得られたin vitroで生物活性を示す化合物，**in vivoで有効性を示す化合物
‡ Proof of Concept：創薬のコンセプトに合致する作用を持つ化合物等の治療効果を実証すること

3つの創薬支援研究機能

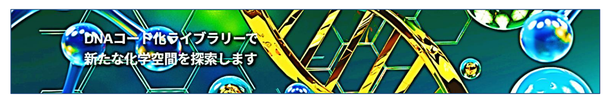
MedChem
創薬化学



ADME*
薬物動態



DEL**
新規技術

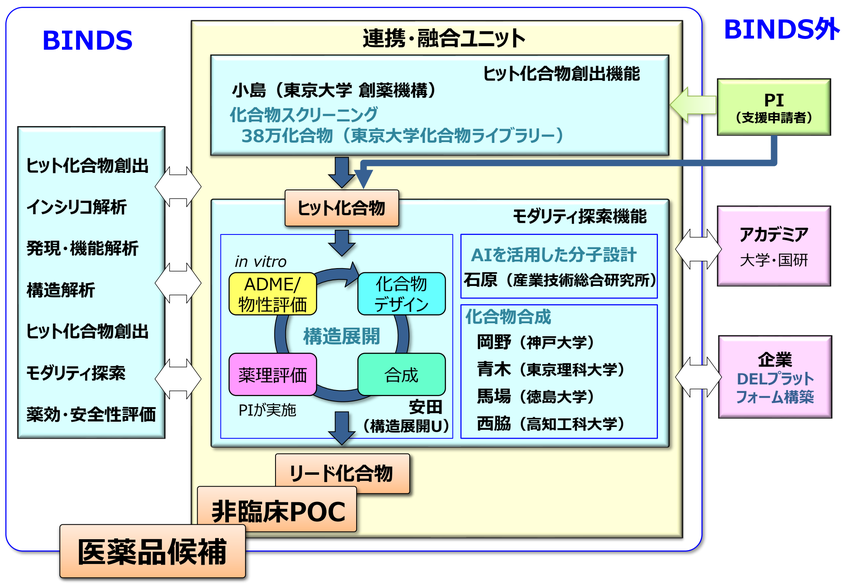


https://www.ddi.f.u-tokyo.ac.jp/

＊ADME：薬物の体内動態（薬物動態）の決定要因の頭文字　吸収（Absorption），分布（Distribution），代謝（Metabolism），排泄（Excretion）
**DEL：DNA-Encoded Library
（化合物に塩基配列の形で化学構造を書き込んだDNA tagを付けた化合物ライブラリ）

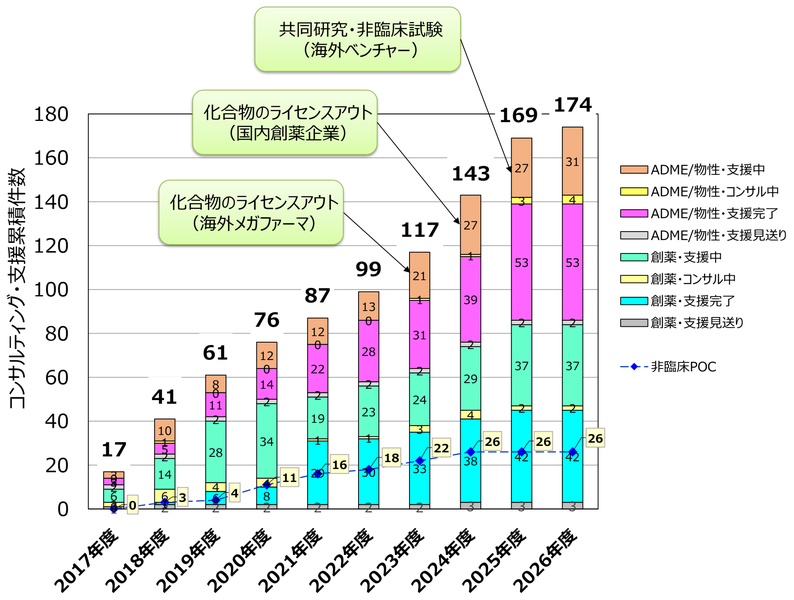
支援の内容

多方面にわたる連携のもとに進める支援

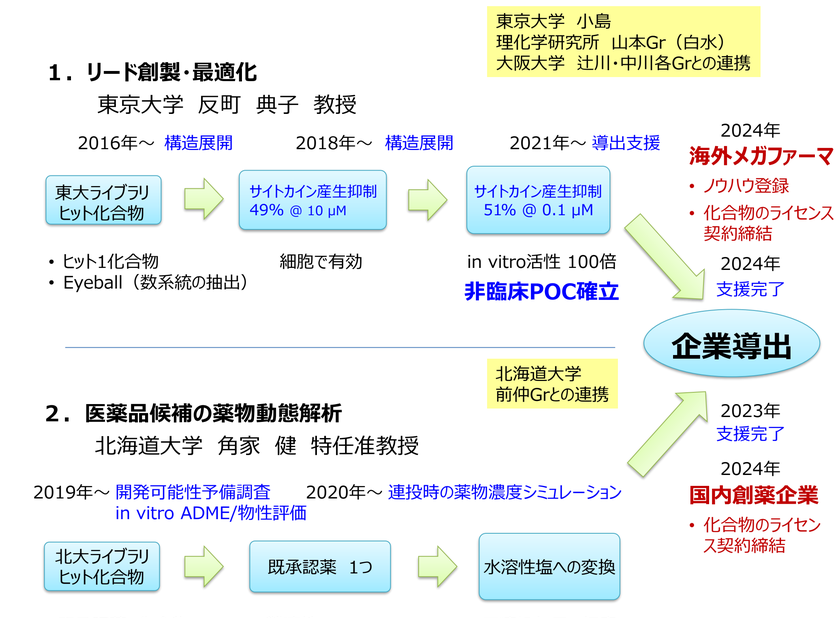


支援の成果

支援件数の推移（2026年8月末現在）



企業導出（化合物のライセンスアウト）



高度化における研究背景・目的

DELスクリーニング・プラットフォームの構築

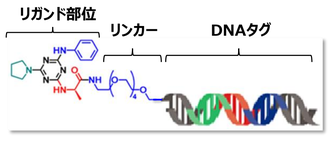
アカデミア創薬における化合物スクリーニング上の課題

➢ **ヒット化合物の質**
➢ **アッセイ数の壁**
- 大学などで行うスクリーニングの化合物数は大半が１万程度
（人的・予算的制限から、製薬企業のような数十万単位のHTS*は困難）

➢ **SAR**情報の不足**
- ヒット化合物周辺のSARの確認で、合成開始までに相当のタイムラグ

＊ High Throughput Screening
**Structure Activity Relationship
（構造活性相関）

DNA-encoded library（DEL）



- 構造情報を塩基配列として記録したDNAタグを結合した化合物（On-DNA化合物）からなるライブラリ
- 強力な活性を有するヒット化合物の取得
- ヒット周辺の豊富なSAR情報

DELを用いたスクリーニングとHTSの比較

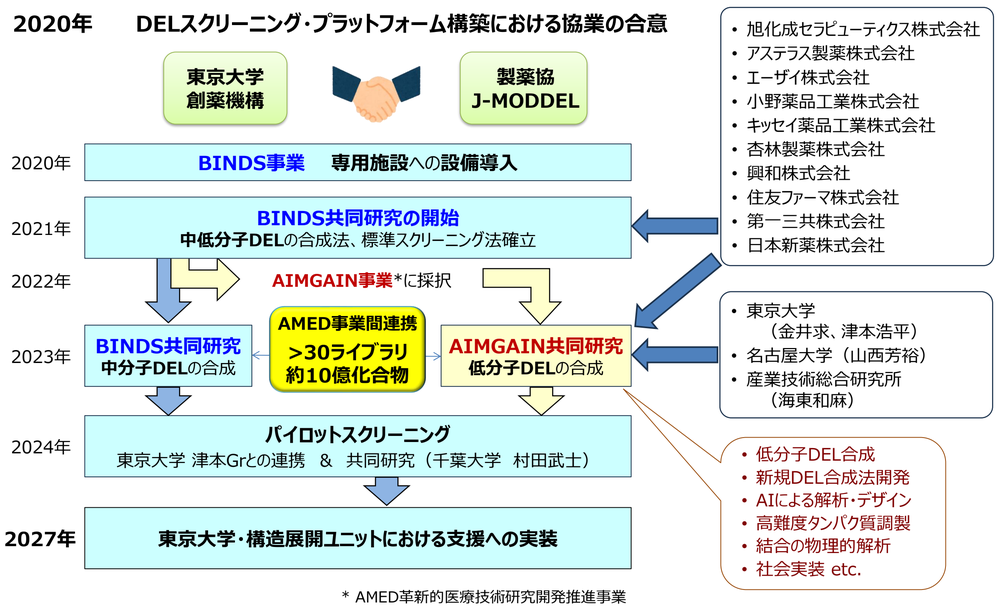


	DELを用いたスクリーニング	HTS
化合物数	数百万～数十億位	～数百万
評価原理	結合	活性・結合
評価条件	標的蛋白質（野生型/変異体）等 複数の実験条件を一度に実施可能	単一条件 （費用・期間の関係でやり直しは難しい）
スクリーニング	シンプル、迅速、低コスト	複雑、時間を要する、高コスト
保管	混合物、 冷凍庫	単一物質、 化合物倉庫システム

善光龍哉・辻川和丈編, 実験医学増刊 42, No.2 2024の図を抜粋改変

産学連携による基盤整備の推進

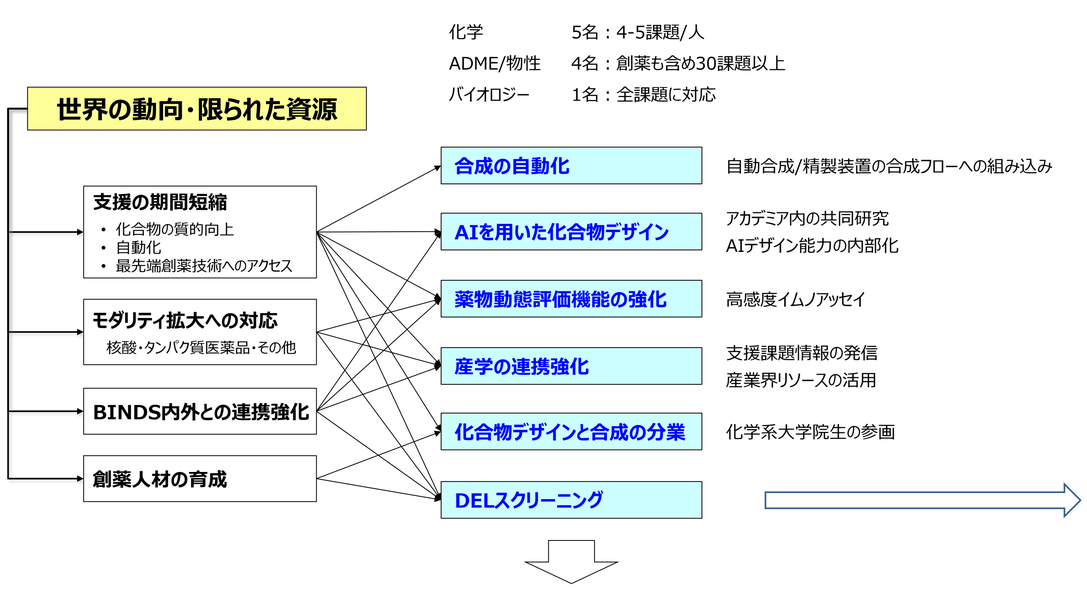
会員企業 9社（現10社）



＊ AMED革新的医療技術研究開発推進事業

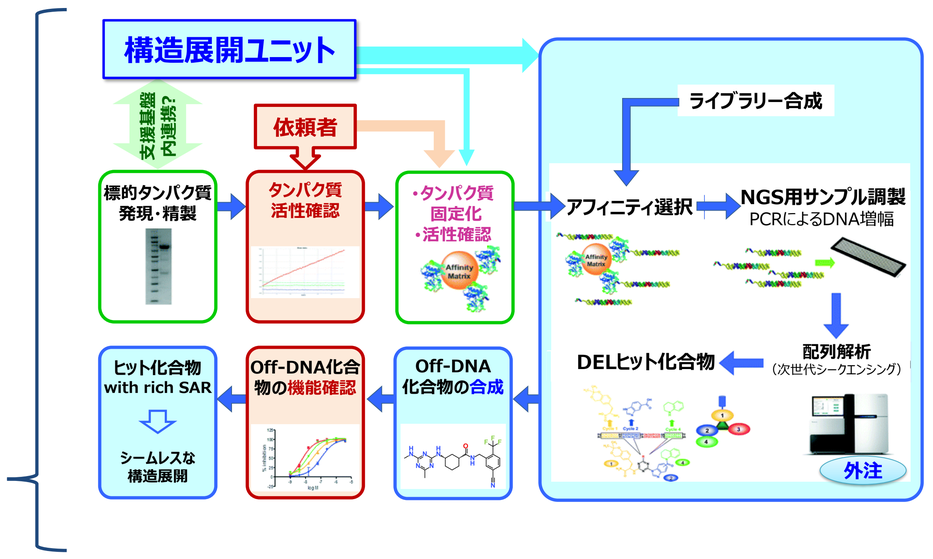
今後の発展

支援における課題と対策



次世代の創薬に相応しい支援体制への転換＆アウトプットの強化

DELスクリーニングの流れ



今年度中に運用開始準備を完了予定

開示すべきCOIはありません