

創薬基盤推進研究事業 研究開発課題
事後評価報告書

研究開発課題名	PPI 界面三次元構造に基づく PPI 化合物ライブラリー
代表機関名	ペプチドリーム株式会社
研究開発代表者名	古谷 利夫
全研究開発期間	平成 27 年度～令和元年度

1. 研究開発成果

事後報告書（下 URL）参照

<https://www.amed.go.jp/content/000065854.pdf>

2. 総合評価

- ・ 優れている。

【評価コメント】

本課題は、PPI 阻害活性を有する中分子化合物ライブラリーの構築という公募に求められる成果を達成し、当初計画の 15,000 個を超える化合物を合成し、DISC（産学協働スクリーニングコンソーシアム）への化合物提供も完了した。また、21 の新規構造の合成にもチャレンジし、達成している。さらに、Keap1/Nrf2 に対し、AI による PPI 予測モデルを開発したことは評価できる。

今後、創薬の基盤としての汎用性を確認するとともに、外部の研究者あるいは企業等と連携し、創薬に向けた有効性検証にAMED とともに取り組んでいき、中分子化合物ライブラリーが医薬品シーズのリソースとして活用されていく展開を望む。

以上