

**創薬基盤推進研究事業 研究開発課題
事後評価報告書**

事業名（年度）	創薬基盤推進研究事業（令和2年度～令和4年度）
研究開発課題名	立体構造規制ペプチドを基盤とした低分子医薬品の次世代デザイン法の開発
代表機関名	公立大学法人大阪 大阪公立大学
研究開発代表者名	藤井 郁雄

総合評価：優れている

【評価コメント】

細胞表面ライブラリー法により、ヘリックスループ-ヘリックス構造モチーフを持つ分子標的活性ペプチドの立体構造情報を基に低分子標的化合物を設計することを目指し、CTLA4、HDM2、VEGFの3種の標的についてバーチャルスクリーニングを計画どおり行った。特に、精度の高いファーマコフォア3次元構造の取得に注力することで、結合活性に及ぼすアミノ酸を同定して、最適なHLHペプチドを見出したことは、PPIを標的とする低分子創薬の基盤となる技術構築として評価する。

ただし、スクリーニング手法としての可能性は示したものの、結合活性や生物活性の評価が検討中の点もあり、本手法の有用性検証は十分といえない。今後、本手法で創出した化合物がシーズとして価値があることのエビデンスを示し、知財戦略を含めてさらに実用化に向けた取組みを継続することを望む。

以上