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5年度～令和7年度）
研究開発課題名	10の60乗の潜在的化合物空間の探索を実現する低分子創薬技術の開発
代表機関名	東京大学
研究開発代表者名	水野 忠快

総合評価：やや良い

【評価コメント】

本研究は、低分子化合物の潜在化学空間の探索を実現し、バーチャルスクリーニングによる候補化合物の探索と活性評価を行う研究である。乱数を起点とする構造生成モデルを用いた新規化合物ライブラリーの構築や、独自の化学言語モデルに基づくスクリーニング系の開発を進めた点は評価できる。一方で、スクリーニング系が新規化合物探索において十分な感度を示すには至らず、薬理活性を示す具体的候補化合物の創出には到達していない点で課題が残されている。

今後は、明らかとなった課題に対する改善策を着実に実行するとともに、本研究で構築した仕組みの有用性をさらに検証し、その活用可能性について検討を進めることを望む。さらに、低分子創薬における候補化合物探索の効率化や精度向上につながる技術として発展させ、実装化につなげることを期待する。

以上