

令和2年度「学術変革領域研究（B）」新規採択研究領域
に係る研究概要・審査結果の所見

領域番号	20B402	領域略称名	シナジー創薬学
研究領域名	シナジー創薬学：情報・物質・生命の協奏による化合物相乗効果の統合理解と設計		
領域代表者名 (所属等)	山西 芳裕 (九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授)		

(応募領域の研究概要)

複数の薬剤の組み合わせによる相乗効果（薬剤シナジー）を活用した化学療法が、がんや神経変性疾患など多因子疾患に対する有効な治療法として注目されている。しかしながら、薬剤シナジーの制御機構の詳細は不明である。本研究では、薬剤シナジーを体系的に研究する新しい学問領域「シナジー創薬学」を提唱し、情報科学・物質科学・生命科学の協奏によって、薬剤相乗効果の統合理解とその設計手法の構築を目指す。薬剤シナジーの制御機構を生体分子ネットワークの視点から解明し、シナジー効果を有する薬剤群をAIで探索、そしてより高いシナジー効果を生み出す新しい化合物群の構造を自在にAIで設計するための基盤技術を構築する。バイオインフォマティクス、ケモインフォマティクス、有機化学合成、薬理学のエキスパートが結集し、研究者の特性・技術を十分に生かした共同研究を行うことによって、「シナジー創薬学」という新しい研究領域を確立する。

(審査結果の所見)

本研究領域は、複数薬剤による相乗効果をバイオインフォマティクスや医療データ解析の組み合わせにより統合的に理解し、相乗効果を理論的に設計可能とする提案である。社会的にインパクトの大きな創薬というテーマに複数分野の専門家が最新手法を用いて挑んでおり、新領域の開拓が期待される。

また、多剤併用の効果はそもそも相乗的かという本質的な問いから、薬物代謝まで考慮した実用例を出せるのかという懸念は出たものの、こうした研究が今求められており、時宜を得た研究提案となっている。

一方、計画研究の連携はよく練られているものの、領域設定期間の3年間という短期間に理論設計した分子を有機合成・検証するまで到達することには懸念がある。このため、研究計画のタイムスケジュールを見直し、それに基づいた計画研究体制の再構成が必要である。