

学術変革領域研究（A）の公募研究の内容

精密高分子のデータ・進化学による次世代医薬創出

<https://polymer-shinka.org/>

領域略称名：高分子進化学

領域番号：25A204

設定期間：令和7(2025)年度～令和11(2029)年度

領域代表者：星野 友

所属機関：九州大学大学院工学研究院

① 領域の概要

合成高分子は、自在に設計したモノマーを共重合するだけで無限大の多様性をもつ化合物ライブラリーを容易に構築可能であり、安価で安定な次世代創薬モダリティとして有望である。近年、高分子の合成技術や精製技術が急速に進歩したことで、分子量やモノマー配列が完全に規定された様々な高分子『精密高分子』を合成できるようになり、精密高分子が特定の抗原を認識できることが明らかになった。

本研究領域では、急速に発展している精密高分子の合成/機能開拓/構造解析に関連する研究者とデータ科学、マテリアルDXプラットフォームに関連する研究者が連携し、更にケミカルバイオロジー、指向性分子進化法等の創薬基盤技術の研究者と協業して新たな学術領域を創出する。同時に医薬開発・臨床現場の研究者と共にモデル動物での実証研究を進め、精密高分子医薬を次々と生み出すプラットフォームを構築する、以て精密高分子医薬という創薬モダリティを創出する。

② 公募する内容、公募研究への期待等

本研究領域では、高分子・合成化学 (A)、情報・計算科学 (B)、生化学・ケミカルバイオロジー (C)、医薬・臨床 (D) と専門性の異なる研究者間の連携を通じ、精密高分子を用いた新たな創薬モダリティの確立を目指す。本研究領域では精密高分子を「モノマー構造の繰り返しから成り、かつ分子量や配列が完全に定義された非天然の高分子」と定義する。従来の学術領域にとらわれず自由な発想で学術を変革するために、多様な背景を持つ研究者からの公募研究を募集する。各研究項目において期待する公募研究の内容を以下に示す。個人研究の提案に加えて領域内の研究者との具体的な共同研究の可能性について記述することも強く望まれる。精密高分子を研究項目Aのグループから供給を受ける前提での提案も可能とする。本研究領域では分子量や配列に分布をもつ高分子のみを扱う研究は対象外とし、分子量や構造が完全に定義された精密高分子を志向した研究提案を募集する。精密高分子は2量体からのオリゴマー及び中分子を含み、それらの分子量は問わない。一方、核酸やペプチドなどの天然の生体高分子骨格のみからなる研究は対象外とする。下記C04に関してはあくまで精密高分子を対象とする前提で生体高分子骨格のみからなる研究も含めて募集する。

A05は、構造が定義された精密高分子の創出技術に関する研究提案を公募する。ポリアクリル、ポリオレフィン系に限らず、ポリシロキサン、ポリエステル、ポリチオフェン、ペプトイド等も含む。精密高分子の配列や立体、トポロジーを制御する研究（不斉合成、環化反応、テンプレート・鋳型重合、側鎖変換、ライゲーシオン反応）や単離精製に関する研究も対象とする。また、構造が原子レベルで精密に制御されたナノ粒子、クラスター、超分子、錯体等を用いた提案も対象とする。

B04は、データ駆動で精密高分子の構造や機能を進化させることを目的とする研究提案を公募する。深層学習モデルによる複合体構造予測や物理学をベースとしたドッキングシミュレーションなどのデータ科学的手法を開発・利用して、対象分子と高い親和性で相互作用する精密高分子医薬の効率的創出を目指す。またNMR、クロマトグラフィー、質量分析、VCD等の構造解析実験を活用し精密高分子の構造を効率的に解析する手法を開発・利用し、必要に応じてデータベース化し、機械学習や計算科学と組みあわせる研究も対象とする。

C04は、精密高分子を進化分子工学的に進化させることを目的とする研究提案を公募する。様々な医薬品・創薬技術を合成高分子に展開して高機能な精密高分子を効率的に開発する提案、更に精密高分子と生体高分子をコンジュゲートすることでこれまでにない機能を示す精密高分子医薬の実現やユニークな進化分子工学実験用ライブラリーを創出する提案などを対象とする。実験用タグとしての利用を見据え、精密高分子に強力に結合するバインダー（抗体・ペプチド・核酸など）の獲得・開発も対象とする。

D05は、精密高分子の医薬応用を目的とする研究提案を公募する。具体的には精密高分子を生体内で機能させるための技術開発、精密高分子を用いた新たな疾患治療法の開発、精密高分子医薬を実用化するために将来障壁になることが推測される課題（免疫原性、体内動態、安全性）の評価、及び解決を目指す研究を対象とする。

③ 公募する研究項目、応募上限額、採択目安件数

研究項目番号	研究項目名	応募上限額（単年度当たり）	採択目安件数
A05	精密高分子の創出	350万円	4件
B04	精密高分子のデータ駆動進化	350万円	4件
C04	精密高分子の共進化システム	350万円	4件
D05	精密高分子を用いた医薬応用	350万円	4件