

2026年7月10日

各位

会社名 Chordia Therapeutics 株式会社
代表者名 代表取締役 三宅 洋
(コード番号：190A 東証グロース市場)
問合せ先 IR マネージャー 吉良 亜実
TEL : 03-6661-9543
MAIL : info@chorditherapeutics.com

AI を活用した新規骨格創出の実証研究に関する論文掲載のおしらせ

Chordia Therapeutics 株式会社（本社：神奈川県藤沢市、代表取締役：三宅洋）は、当社が前臨床研究段階における取組の一つとして実施した、AI を活用した新規骨格化合物の創出に関する研究成果を報告しました。本研究成果は、株式会社理論創薬研究所および Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社の研究チームとの連携のもと創出されたものです。このたび、本成果をまとめた論文が 2026 年 7 月 8 日に *ChemMedChem* 誌でオンライン掲載されましたのでお知らせします。

論文概要

創薬研究において、新たな化学骨格（スキヤフォールド）の創出は、知的財産の確保や化学空間の拡張につながる重要な課題です。しかし、既存の活性化合物から薬理活性を維持しながら新規骨格へと変換することは容易ではなく、依然として創薬化学における大きな挑戦となっています。本研究は、当社の前臨床研究段階にある 5 番目の新規パイプラインの研究活動の一環として、AI を活用した新規化学骨格創出技術の有効性を検証することを目的に実施しました。そのモデルケースとして PI3K/mTOR 阻害薬を採用しました。PI3K/mTOR 阻害薬はこれまでに多数報告されている一方で、その多くが限られた化学骨格に集中していることから、新規骨格創出の実証に適した題材であると考えられます。

本研究では、AI を活用した分子設計プラットフォーム「DeepSARM」を用いて、既存の PI3K/mTOR 阻害薬である samotolisib を出発点として多数の新規候補化合物を生成しました。さらに、バーチャルスクリーニングを組み合わせることで有望な候補を選抜し、既存薬とは異なる新たな骨格を有する化合物を設計・合成しました。合成した化合物は酵素阻害試験において PI3K α に対する阻害活性を示しました。さらに、最新の AI ベース分子モデリング技術である Boltz-2 を用いた解析から、標的タンパク質との合理的な結合様式も示唆されました。今回得られた骨格は、出

発化合物である samotolisib の複雑な三環性構造とは大きく異なるシンプルな構造でありながら、PI3K 阻害活性を保持していることが確認されました。

本成果は、AI や計算科学を組み合わせることで、従来の創薬研究では見出しにくいとされていた新しい化学構造を効率的に創出できる可能性を示したものです。今後、当社の新規パイプラインの創薬標的へ展開することで、新規化合物の創製や創薬研究の効率化に貢献することが期待されます。

論文情報

Integrative Molecular Scaffold Generation of PI3K/mTOR Inhibitors Using DeepSARM and Ligand-Based Virtual Screening Approaches

ChemMedChem, Jul. 8, 2026

URL : <https://doi.org/10.1002/cmdc.70362>

投稿先の学術誌について

ChemMedChem は、国際学術出版社である Wiley と欧州化学会連合 (Chemistry Europe) が発行する医薬化学分野の国際学術誌です。創薬に関する化合物設計、合成、薬理評価、計算化学、ケミカルバイオロジーなどの研究成果を幅広く掲載しています。

用語集

用語	解説
Boltz-2	米国 MIT (マサチューセッツ工科大学) の研究者を中心に開発された、AI を活用したタンパク質の立体構造、並びにタンパク質-低分子化合物複合体の構造予測技術です。候補化合物が標的タンパク質のどこにどのように結合するかを予測、評価でき、創薬研究における作用機序の理解や化合物設計を支援します。
DeepSARM	株式会社理論創薬研究所の吉森博士らが開発した、AI・機械学習を活用した分子設計技術です。既存の薬剤や活性化合物の化学構造を学習し、その知識を基に新たな化学構造や化学骨格を提案することができます。
PI3K/mTOR 阻害薬	細胞の増殖や生存を制御する PI3K/AKT/mTOR シグナル経路を標的とする分子標的薬です。PI3K と mTOR は多くのがんで異常に活性化していることが知られており、これらを阻害することでがん細胞の増殖を抑制することが期待されます。
バーチャルスクリーニング	コンピュータを用いて多数の化合物を評価し、薬の標的となるタンパク質に作用する可能性の高い候補化合物を効率的に選び出す技術です。実験前に有望な化合物を絞り込むことができるため、創薬研究の効率化や開発期間の短縮に役立ちます。



Chordia Therapeutics 株式会社について

当社は、臨床開発品を擁するがん領域専門の研究開発型バイオベンチャーとして、神奈川県藤沢市に本社を置き活動しています。当社のリードパイプラインである CLK 阻害薬 rogocekib (CTX-712) は、米国での第 1/2 相試験を進行中です。rogocekib は、がんの脆弱性をターゲットにしており、有望な治療薬としての可能性が期待されています。また、当社は、リードパイプラインの rogocekib、MALT1 阻害薬 ocipumaltib (CTX-177) に加え、CDK12 阻害薬 CTX-439、GCN2 阻害薬など、複数のパイプラインの研究開発に取り組んでいます。

詳細は、当社ウェブサイト (<https://www.chordiatherapeutics.com/>) をご覧ください。