

附件 3:

2025 年药学科学领域开放课题资助方向

1. 新药发现与机制研究

- 1) 药物设计与合成新方法: 基于靶点结构/信号通路的先导化合物发现及合成新策略;
- 2) 天然产物的筛选与机制研究: 基于天然产物的抗肿瘤或神经保护化合物筛选及其作用机制研究;
- 3) 智能药物研发技术: 深度学习驱动的化合物活性预测与虚拟筛选, AI 辅助的新型分子结构设计与合成路线规划, 药物副作用知识图谱构建与风险预警模型等;
- 4) 药物作用机制与耐药性研究: 神经或肿瘤的药物代谢动力学、靶点调控网络解析及耐药性分子机制;
- 5) 人源化模型的开发和验证: AI 增强的人源化模型构建用于药物疗效预测及临床转化价值评估。

2. 药物评价与递送

- 1) 药物相互作用研究: 不同药物在体内的代谢路径、酶促反应及相互作用网络分析;
- 2) 药物毒理学评估与安全性筛选: 建立 AI 驱动的毒性预测模型, 整合代谢组学与深度学习技术评估新药的代谢毒性、免疫毒性和神经毒性;
- 3) 药物代谢与生物标志物研究: 构建 AI 赋能的代谢路径分析平台, 通过多组学数据融合预测患者对神经/肿瘤药物的个体化治疗响应;
- 4) 靶向药物递送系统的设计与验证: 纳米载体、脂质体、聚合物胶束等新型药物递送系统的创新与优化;
- 5) 新型药物制剂的开发与评价: 特定药物制剂的定量检测与质量控制方法研究。

3. 药物经济学&药物政策管理

- 1) 价值医疗导向下的药物经济学研究: 利用健康医疗大数据, 对医疗服务过程、疾病转归、以及相关患者生活质量的方法学探索;
- 2) AI 赋能药物经济学研究: AI 技术处理和分析来自真实世界数据源(如电子健康记录、保险索赔数据)或数字健康技术(如可穿戴设备)的大数据集, 模拟

医疗干预措施的患者健康获益及经济性；

- 3) 创新激励视角下国家医疗保障体制的优化策略:多层次医疗保障体系的优化改革研究以及创新药发展角度下的国家医保目录调整策略研究。

4. III 临床研究和真实世界证据

- 1) 不同治疗手段/方案联合模式:创新药物组合疗法在特定癌症患者中的有效性和安全性评估;
- 2) 基于生物标志物的患者分层:结合特定生物标志物与靶向治疗或免疫治疗优化治疗方案的临床及机制研究;
- 3) 患者报告结局 (Patient-Reported Outcomes): 临床试验中患者报告结果数据的影响。

5. 精准药学研究

- 1) 基于药物基因组的个体化用药指导药物临床研究的生物标志物探索;
- 2) 基于多模态影像融合病理特征量化分析的神经疾病/肿瘤智能诊断系统研发。