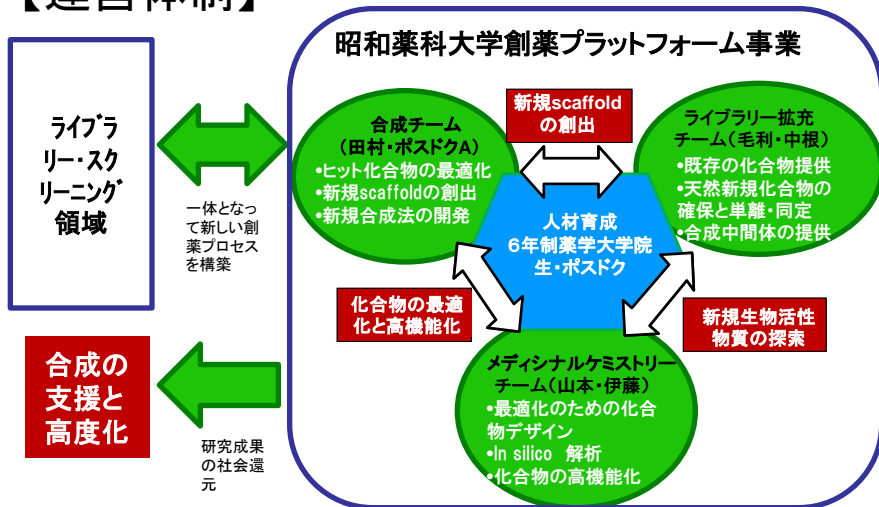


【課題概要】

- 3つの研究課題にそれぞれチームを編成して取り組む。
1. SPU* 化合物ライブラリーの構築(支援と高度化)
 2. ヒット化合物の最適化(支援)と新規合成法の開発(高度化)
 3. メカニズムを基盤としたデザインと高機能化(支援と高度化)

* SPU: Showa Pharmaceutical University

【運営体制】



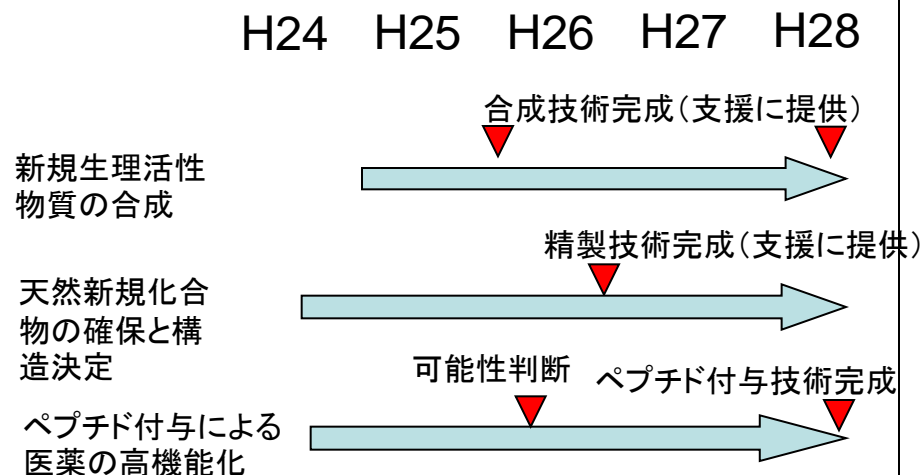
【連絡先】

昭和薬科大学 薬学部
山本恵子
Tel: 042-721-1580
yamamoto@ac.shoyaku.ac.jp

【支援に供する技術】

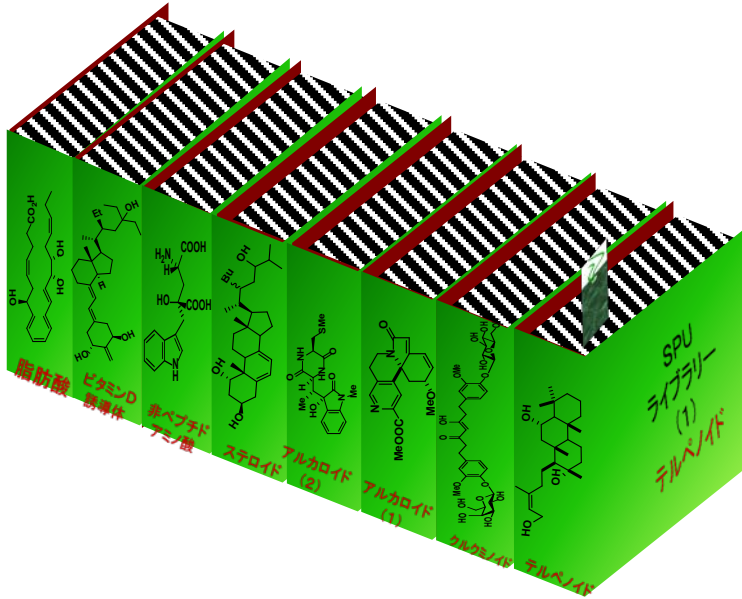
- ◆含窒素化合物の合成
- ◆植物から天然物単離・構造決定
- ◆In silico ドッキング解析
- ◆Structure based drug design (SBDD)
- ◆受容体リガンドや酵素阻害剤の設計と合成
- ◆ビタミンDや脂肪酸誘導体の合成
- ◆In vitro アッセイ
- ◆タンパク質のX線結晶構造解析

【高度化研究】

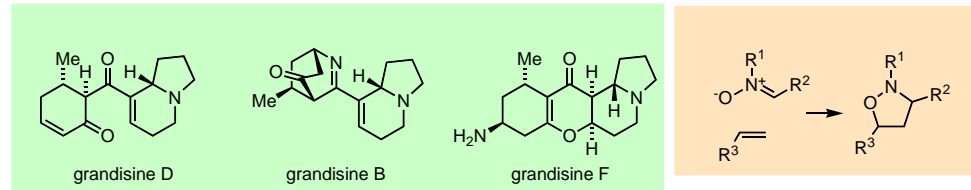


【これまでの研究実績と創薬等PFにおける事業内容】

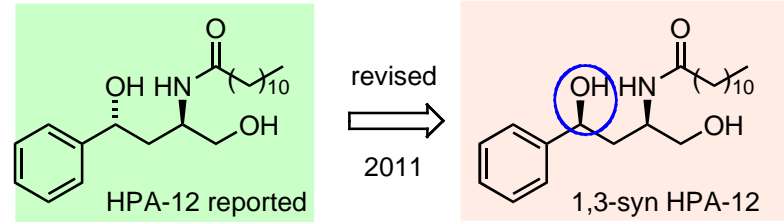
1. SPU化合物ライブラリーの構築(支援と高度化)



2. ヒット化合物の最適化(支援)と新規合成法の開発(高度化)



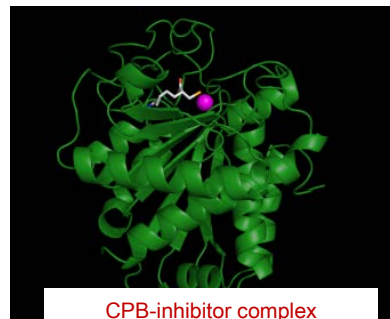
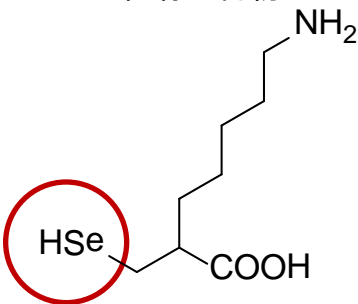
ニトロンの環化反応やラジカル環化反応を用いた含窒素化合物合成が得意



HPA-12はセラミド輸送タンパクCERTの阻害剤である

3. デザインと高機能化(支援と高度化)

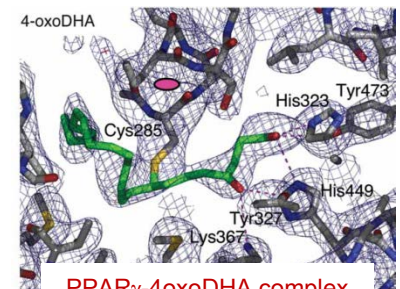
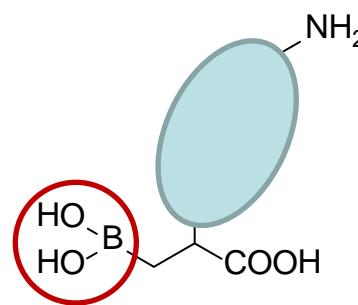
◆セレン含有化合物



線溶促進剤として特許出願:特願2011-53842(2011年3月11日出願)

他の亜鉛含有メタロプロテアーゼへの展開
antioxidantとしての期待

◆ホウ素含有化合物



PPAR γ -4oxoDHA complex
Nat Struct Mol Biol. **15**, 924-931 (2008)

各種メタロプロテアーゼ阻害剤

共有結合形成化合物

タンパク質中のSer, Thrと共有結合
中性子捕捉療法