

実践的な創薬研究支援

— ヒット化合物の周辺化合物の検索と提案 —

[技術の概要]

◆ 支援メニュー

- 約570万化合物データベース活用
- ヒット化合物の周辺化合物をサーチ
 - 迅速な構造検索とフィードバック。
 - drug-likenessを考慮して購入候補化合物を提案し、合成研究に活用中。
 - アカデミアやベンチャー等での非常に限られた合成戦力を補完し、合成研究を加速。

支援に供する設備名等: ISIS database

ヒット数
13 of 347

NAMIKI_ID
NS-10067501

Supplier

Supplier	IDNUMBER
Bionet	BS-3049
Vitas-M	BBL024777
Matrix	111972

Supplier情報

ヒット化合物の一例

検索構造式

C12H11FN2O
MOLWEIGHT 218.2299
CATEGORY_NAME 201410BB

[技術の利用例]

◆ 合成研究課題等での活用

- 学内S3研究課題
- 本学HTS機器活用した学外の創薬研究
 - 他大学のスクリーニング課題
 - 企業のスクリーニング課題
- 数検体～数十検体を提案し、予算に応じて購入し、ヒット化合物のSAR(構造活性相関)展開に活用(予定)。

連絡先

[所属] 大阪大学薬学研究科

[名前] 辻川和丈、寺下善一

[E-mail] pf-project@phs.osaka-u.ac.jp