



キーワード：有機化学、低分子創薬、ケモインフォマティクス

有機化学と計算化学による創薬研究

薬学部 薬学科 教授
河合 健太郎 KAWAI Kentaro

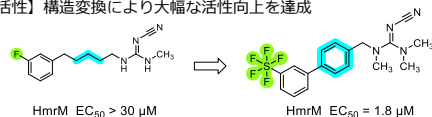
研究の内容

医薬品化学研究室では、製薬企業で17年間の研究経験を有する教員が主導し、アカデミア創薬を行っています。有機合成と計算科学を基盤とした研究を行っており、研究の一例として、左下の図に示すように、新しい抗菌剤の創薬研究などを行っています。左の化合物の緑（Fの部分）や青（炭素の部分）で色付けした部分を変換することで、活性を大幅に向上させることに成功しています。また、AIを使った創薬基盤の開発にも取り組んでおり、右下の図に示すような活性予測AIのほか、分子設計AIなどを開発しています。

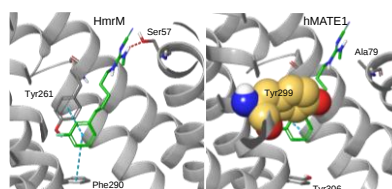
◆ 創薬シーズ（新規化合物）の合成

例）多剤耐性菌を標的とした創薬研究

【活性】構造変換により大幅な活性向上を達成



【選択性】in vitro試験により選択性を有することを確認

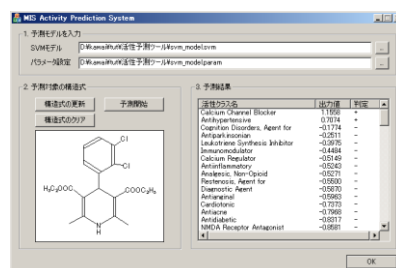


左：細菌のタンパク質には薬物が結合して作用を示す。
右：ヒトのタンパク質には結合せず、作用を示さない。

◆ 人工知能（AI）による創薬基盤の開発

例）活性予測AIの開発

構造式を描画するだけで、多種多様な薬理作用の有無が予測できる



新規な化合物に対して、カルシウムチャネル阻害作用と抗高血圧作用が予測された例

産学連携・社会連携へのアピールポイント

製薬企業で17年間に及ぶ低分子創薬の研究経験、特許クレーム案の作成経験を有しており、企業経験を生かした社会貢献が可能です。

医薬品化学研究室

URL : <https://www.setsunan.ac.jp/~medchem/>

