

創薬基盤化学研究若手セミナー  
特別講演会

① 講師 **古徳直之先生**

大阪大学大学院薬学研究科・助教

演題

「海洋天然物のケミカルバイオロジー  
研究と創薬への展開」

② 講師 **川下理日人先生**

大阪大学大学院薬学研究科・助教

演題

「計算化学を用いた抗ウイルス剤の探索」

日時: 11月15日(金) 午後4時から

場所: サイエンスコア 会議室4

教員、大学院生の多数のご参加をお待ちしています！

薬学部 精密合成化学 土肥寿文 (EX 2: 8207)

## 古徳 直之 先生 講演内容の概要（午後4時より）

### 【ショートアブストラクト】

これまで演者らは、研究室で独自に構築した評価系をもとに見出した活性天然物を有用な医薬シーズ分子として位置づけ、全合成研究や類縁体合成による新規リード化合物の創出を目指して検討してきており、幸運にも動物実験で良好な活性を示す化合物を見いだすことにも成功している。しかし、そこに至るまでにはランダムな類縁体合成による膨大なトライ&エラーの繰り返しで多くの時間と労力を要するのが現状である。そこで、従来型の類縁体合成にとどまらず、活性物質の標的分子を明らかにし、その構造から論理的に設計・合成することが重要であると考え、活性物質由来のアフィニティープローブの合成とこれを用いた標的特定研究にもトライしている。今回は演者らがこれまで行ってきた、精密有機合成を基盤とする創薬化学研究およびケミカルバイオロジー研究の一端について紹介する。

## 川下 理日人先生 講演内容の概要（午後5時頃より）

### 【ショートアブストラクト】

主として熱帯・亜熱帯地域で流行しており、年に5千万人～1億人の感染がみられる Dengue ウイルス感染症は、しばしば死亡率の高い Dengue 出血熱を発症する。この感染症はネッタイシマカなどの蚊によって媒介されているが、近年の地球温暖化に伴って蚊の生息範囲が徐々に北上する傾向にあるため、将来的にはこの感染症の日本への流入が危惧されている。その一方で、この感染症に対するワクチンや治療薬は現在のところ臨床利用されておらず、Dengue ウイルス感染症の治療にはこれらの開発が重要な位置を占める。本セミナーではそのような背景下、Dengue ウイルス NS3 プロテアーゼに対する Docking シミュレーションを用いた阻害剤探索を紹介する。