

極微量活性成分の構造解析に立脚した創薬スキーム開発

研究開発代表者: 東京大学 国際高等研究所東京カレッジ 卓越教授 藤田 誠

低分子創薬の現状と構造解析への潜在的ニーズ

生命活動で暗躍する痕跡量活性物質は創薬標的の宝庫であるが、痕跡であるが故にその正確な3次元構造にたどり着く術がない。痕跡量物質の構造解析手法に対する計り知れない「潜在的ニーズ」がある。代表者は痕跡量物質のX線構造解析を可能とする「結晶スポンジ法」*を開発し、ニーズに応える突破口を切り開いた。

*結晶スポンジ法:



1. ゲスト吸蔵
2. 回折実験

細孔性金属錯体結晶に微量標的物質を吸蔵させるだけで、標的化合物をX線観察できる

統合分子構造解析の世界研究拠点の構築

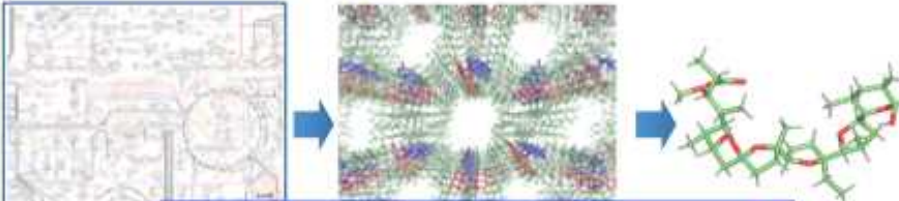
あらゆる生命科学的研究は分子の構造を知るところから始まる。独自技術である結晶スポンジ法を中核に、**アカデミア、スタートアップ、連携企業（14社）**が一体となり、**世界に唯一無比の統合分子構造解析拠点を非競争的に構築し、成果を創薬基盤技術として展開**することで、低分子創薬のパラダイムシフトを引き起こす。

- シナリオ ↓
- ・製薬とアカデミアの総力で、さまざまな痕跡量活性成分（構造未知）を入手する。
 - ・装置メーカーと連携し、わずかfg-ngオーダーの絶対量で、未知活性化合物を正確に構造決定する。
 - ・製薬および(株)ナールスとの協業もしくは新規開発ベンチャーの設立（**出口戦略**）により、リード化合物へ絞りこむ。
 - ・参画企業の競争領域での利活用（**出口戦略**）。

社会連携講座（コンソーシアム活動母体）

- ・すでに14社加盟の社会連携講座が東大に設置されている。
- ・過去7年間の実績で、>20社が参画。技術導出例も多数。
- ・専用の拠点（実施場所）を千葉県柏市に確保している。
- ・**国産主要装置メーカー3社の合同ラボが実現**
- ・**大学発ベンチャー企業(株)ナールスが参画、その商品開発ノウハウや販売網の活用**

期待される成果（一例）



メタボローム解析重要因子物質（痕跡量）をCS法で構造解析し、創薬リード化合物へ導く