

キッセイ薬品工業株式会社 中央研究所 分子設計室の紹介

創薬研究部 創薬企画室 辻 英一

キッセイ薬品工業、中央研究所は長野県の穂高町に所在しています。研究所からは常念岳を望むことができ、自然環境には大変恵まれた中で創薬研究に励んでいます。

分子設計室では生体高分子の立体構造に基づく薬物設計、及び薬物候補化合物群のQSAR/3D-QSARに基づく薬物設計を中心に行っています。また、近年の創薬技術の長足の進歩に見合うような手法の開発も念頭に置きながら、リード探索や最適化を行い、その成果も少しずつ現れてきています。

蛋白質の結晶構造解析は2名が担当し、自前で標的酵素の大量発現、精製を行い、得られた結晶の構造解析にチャレンジしています。そして、有機合成化学、理論化学のバックグラウンドをもつ2名のcomputer chemistが、各プロジェクトの有機合成担当者と綿密な連携をとり薬物の理論的な設計を行っています。その結果は次の結晶構造解析を行うための重要な情報としてフィードバックされ、薬物設計の効率化を目指しています。更に、自社化合物ライブラリーの充実も検討しており、コンビナトリアルケミストリーとの連携の強化を図っています。

当研究室に保有している装備はSGI社ワークステーション4台、X線回折装置2台（高分子用と低分子用）、各種X線結晶構造解析、分子設計用ソフトウェアとなっています。

これまで国内外の研究機関、ベンチャー企業との協同研究を通じて、創薬技術の習得を心がけて来ました。未だ発展途上ではありますが、実際のテーマに応用した上での経験を生かして、オリジナリティーの高い新薬の創製を目標に日々の研究業務に注力しています。最後に、現在のところはTARAプロジェクトには参画しておりませんが積極的に創薬研究に活用したいと考えています。宜しくお願い致します。



写真：左より 小沢(Comput.Chem.)，富長(X-ray)，辻(X-ray)，小澤(Comput. Chem.)