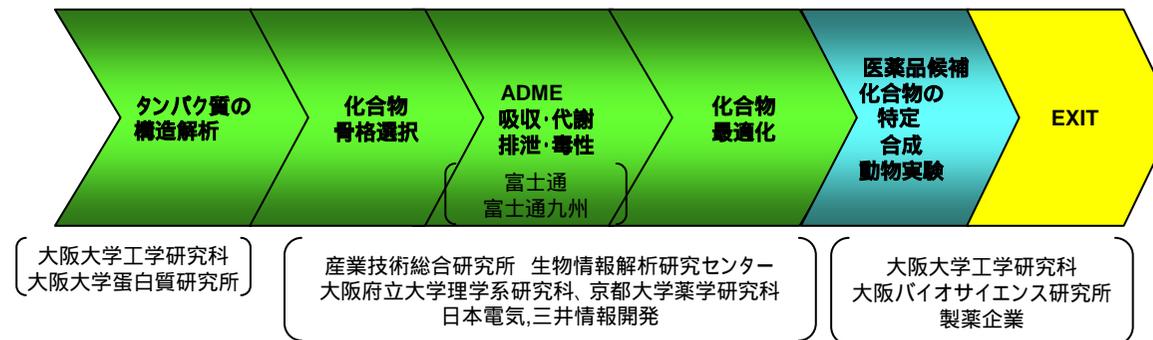
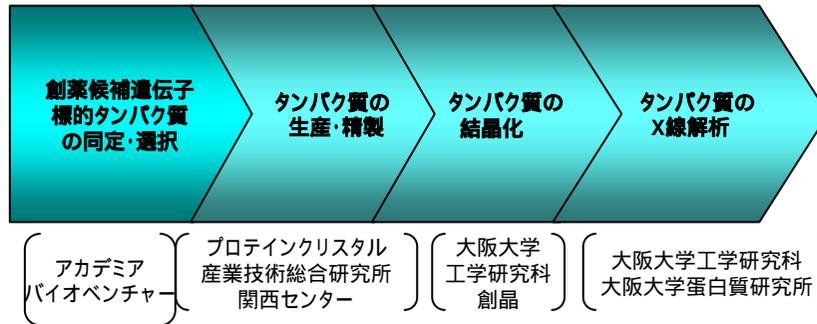


バイオ研究者・バイオ産業が連携し、  
成果をスムーズに創薬へつなげる  
**「創薬バリューチェーン」を構築**

- 特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西  
– 理事 坂田恒昭
- 大阪大学工学研究科 創晶プロジェクト  
– 井上 豪(つよし)(NPO法人バイオグリッドセンター関西理事)

# 創薬バリューチェーン

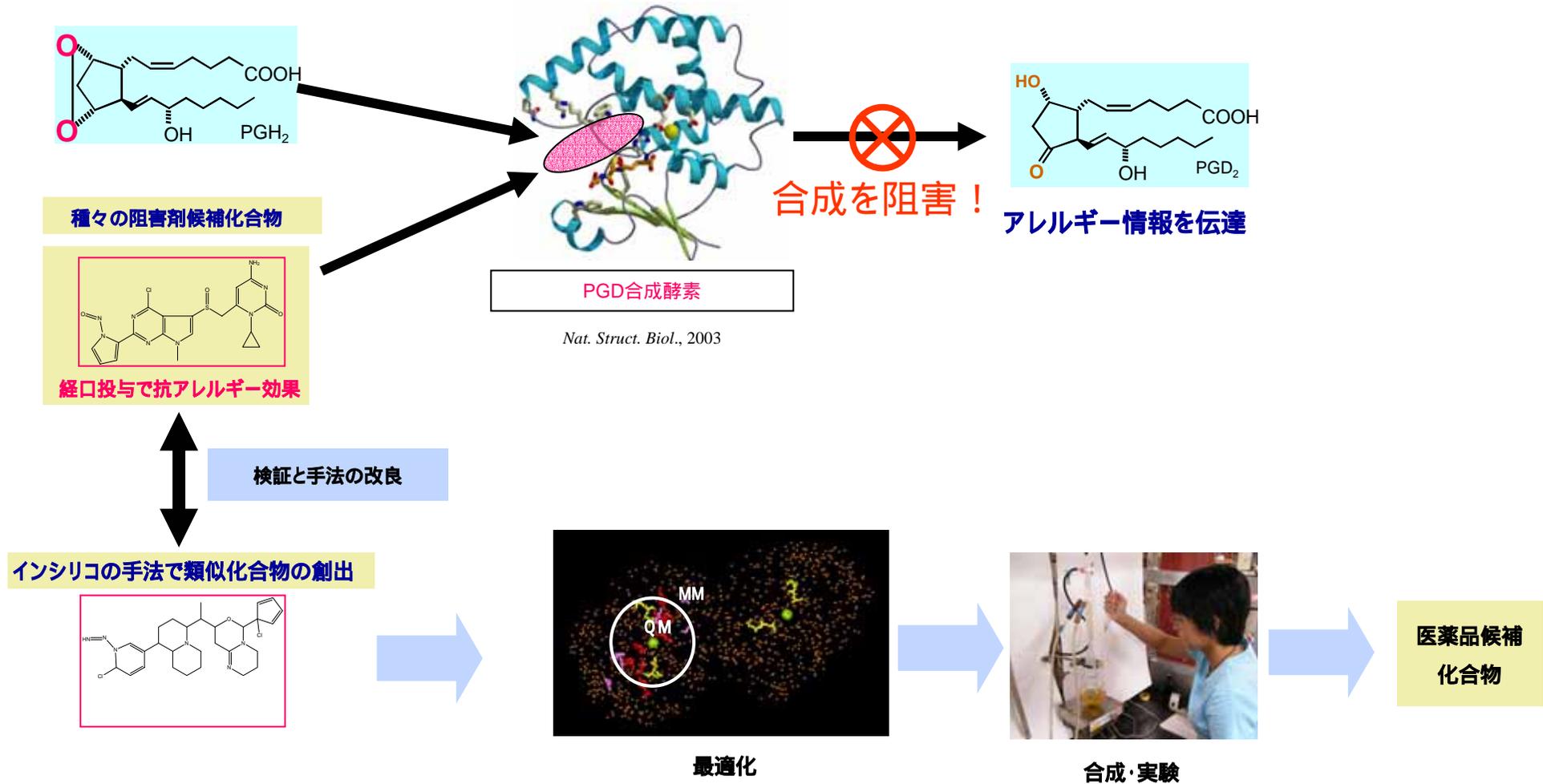


2005/11/4

NPO法人バイオグリッドセンター関西  
大阪大学工学研究科創晶プロジェクト

# インシリコでの創薬手法の確立とその実証研究 (大阪北部(彩都)地域知的クラスター創成事業)

- ヒト由来プロスタグランジンD合成酵素(H-PGDS)の活性阻害剤の開発による実証研究
  - 経口投与で抗アレルギーや筋ジストロフィーに効果があることが実験的に証明されている化合物と同程度の化合物をインシリコを用いた手法で創出できるか検証



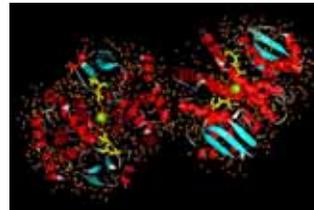
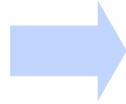
2005/11/4

NPO法人バイオグリッドセンター関西  
大阪大学工学研究科創晶プロジェクト

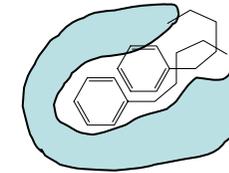
# 新規標的タンパク質の活性阻害剤の開発



タンパク質の合成・結晶化



結晶構造解析



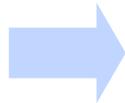
ドッキングシミュレーションによりヒット化合物設計



SPring-8  
Copyright  
JASRI



地球シミュレータ  
Copyright  
ESC/JAMSTEC



Parameter	Value	Unit
ADME	1.5	h
ADME	2.5	h
ADME	3.5	h
ADME	4.5	h
ADME	5.5	h
ADME	6.5	h
ADME	7.5	h
ADME	8.5	h
ADME	9.5	h
ADME	10.5	h

ADME



最適化



合成・実験



医薬品候補化合物

# 今後の展開



2005/11/4

NPO法人バイオグリッドセンター関西  
大阪大学工学研究科創晶プロジェクト