

次の創薬研究のヒントが見つかる 天然物に特化したデータベース“天然物辞典”

千葉大学大学院 薬学研究院 生体機能性分子研究室 高山 廣光 教授



創薬研究のスタートは、活性を持つ天然物の発見から
私たちの研究室では、天然物、特に植物からの創薬研究をメインテーマとして取り扱っています。

天然物の中から新しい活性のある物質を見つけ、その物質を全合成し、活性評価や構造活性相関を調べ、医薬品の候補化合物を創製するという一連の流れを包括的に行っています。研究の対象化合物として、アルカロイドに絞っていることも当研究室の特徴と言えます。

例えば、タイやマレーシアで疲労回復の効果が伝えられている植物 *Mitragyna speciosa* の葉について調べたところ、非常に強いモルヒネ様の鎮痛活性を持つ新規インドールアルカロイドが微量に含まれていることが分かりました。これを化学合成してさらに調べると、皮下投与によって効果を発揮するモルヒネとは異なり、経口摂取でも効果のあることが分かりました。

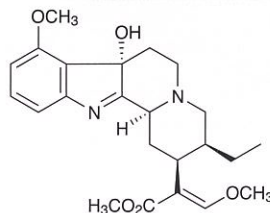
幅広い検索性を特徴とする、天然物研究には必須のツール

一つの素材植物から活性成分を発見するのは簡単なことではありません。多いときは100ほどの成分を単離し、それぞれのスペクトルを測定して、構造を決めることが必要となります。こうしたときに、「天然物辞典」のデータベースが大いに活躍します。

例えば、NMRで構造の一部が分かたら、部分構造検索を行うことで候補化合物がすぐに見つかります。関連文献が分かるので、そこで報告されているデータと見比べながら、目的化合物の構造を決定することができます。すぐに化合物の顔が見えるのが「天然物辞典」の大きなメリットです。また、外部リンクの生物種データベース「Catalogue of Life」を使うことで、俯瞰した生物学的起源情報が得られて次の研究のヒントを得ることができます。

「天然物辞典」なら、まだ誰も合成したことのない物質を探せる
この「天然物辞典」は、私たちのように天然物に含まれる化合物を研究している方には必須のツールです。あるいは、反応開発について研究している方などは、新しい合成ターゲットを探すために「天然物辞典」を使われるのはいかがでしょうか。誰も合成したことのない物質を作ることができたら、それは新しい反応開発の大きなアピールポイントになるのではないかと考えます。

※ 詳しくは…… [天然物辞典 インタビュー](#) [検索](#)



7-Hydroxymitragynine
(*Mitragyna speciosa* に含まれるインドールアルカロイド)

■天然物辞典の検索結果画面および7-Hydroxymitragynine のレコード

右上のベンゼン環のマークをクリックすると、構造式の表示が可能。

誘導体と立体異性体も同時に閲覧可能。

JAICI
化学情報協会

CRC CRC Press
Taylor & Francis Group

天然物辞典
Dictionary of Natural Products
29万件を超える天然物の各種物性値、生物学的起源、文献情報を収録したデータベースです。年2回のアップデートで、つねに最新の天然物情報へアクセスできます。

■お申込・お問い合わせ…科学データ情報室まで TEL: 03-5978-3622 FAX: 03-5978-3600 E-mail: crystal@jaici.or.jp

