

# 生物活性物質の合成・機能解析・分子設計

## 研究分野

天然物化学、有機合成化学、計算化学、木質バイオマス、リグニン化学

## 研究内容

私たちは、有機合成化学と計算化学を基盤とした、生物活性物質の合成と設計に関する研究を行っています。天然に存在する重要な生物活性を有する分子(天然物)を研究対象として設定し、人工的な化学合成(全合成)と構造・配座活性相関による機能解析、合理的な分子設計により、医薬品の創製を目指します。

さらに、地球温暖化防止のため、再生産可能な資源である木質バイオマス(セルロース、ヘミセルロース、リグニン)の成分分離法の開発や有用物質への変換を目指した研究も行っています。

## 私達の研究のポイント

- 1) 天然物の全合成: あらゆる有機合成化学の技術を組み合わせ、複雑な構造と重要な生物活性を持つ天然物や類縁体を、独自の戦略に基づき合成します。また計算化学を活用して、反応の解析や合成中間体の設計を行います。
- 2) 合成分子の機能解析: 分光学的手法と計算化学を用い、1)で合成した分子の動的な構造解析と活性評価を行います。
- 3) 生物活性物質の分子設計: 2)で得た知見を基にして、人工生物活性物質の合理的設計を行います。
- 4) 人工リグニンポリマーの合成: 構造の明確な人工リグニンを合成し、リグニンの機能や反応性の解明、有用物質への変換を目指します。
- 5) バイオマスリファイナリー<sup>(\*)</sup>: イオン液体を用いた木質バイオマスの成分分離と有用ケミカルの生産のための技術を開発します。



生物有機化学講座  
教授 占部 大介



生物有機化学講座  
准教授 岸本 崇生

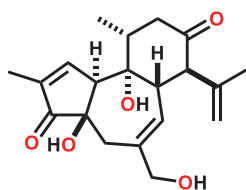


生物有機化学講座  
助教 深谷 圭介

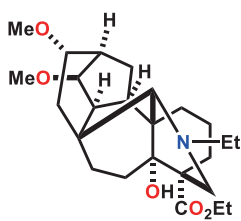
## REPORT リポート

### 複雑な構造と重要な活性を持つ天然物の全合成研究

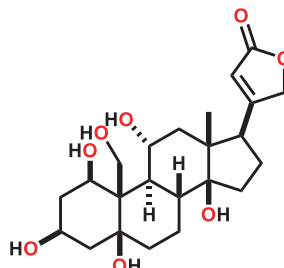
これまで合成した天然物及び天然物類縁体の構造



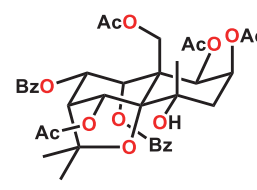
クロトホルボロン  
(発癌プロモーターの同族体)



プレベルリンCのモデル化合物



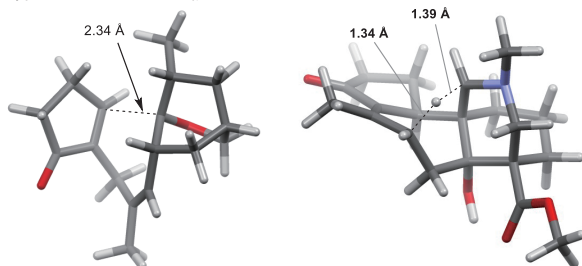
ウアバゲニン  
(Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPase阻害剤のアグリコン)



4-ヒドロキシジノール  
(P-糖タンパク阻害活性)

### 計算化学による反応解析と分子設計

DFT計算によって求めた遷移状態図



7-endo-ラジカル環化

1,5-水素移動

### 木質バイオマス: 人工リグニンポリマー

