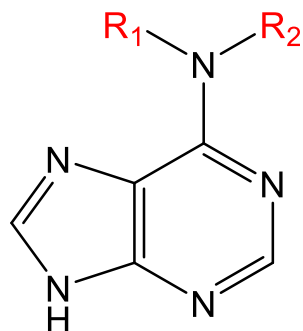
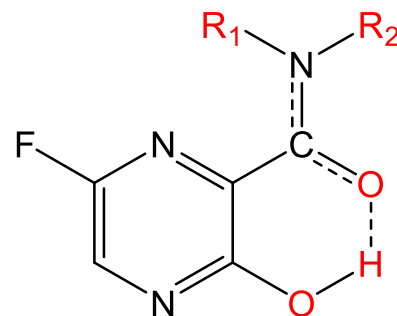


抗活性酸素・低分解性に着目した 抗ウイルス薬の開発



Veklury
Remdesivir-base



Avigan
Favipiravir-base

炎症器官で分解しない抗ウイルス薬の開発を目指す



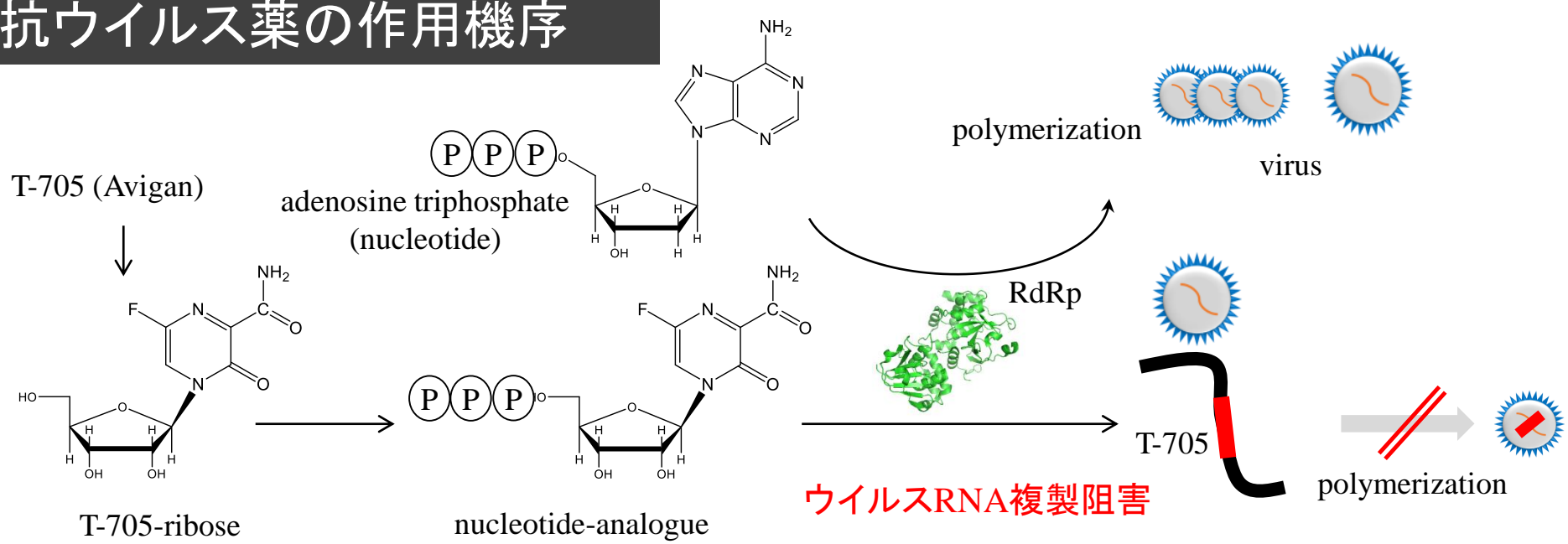
Gifu Pharmaceutical
University

岐阜薬科大学機器センター 中山辰史

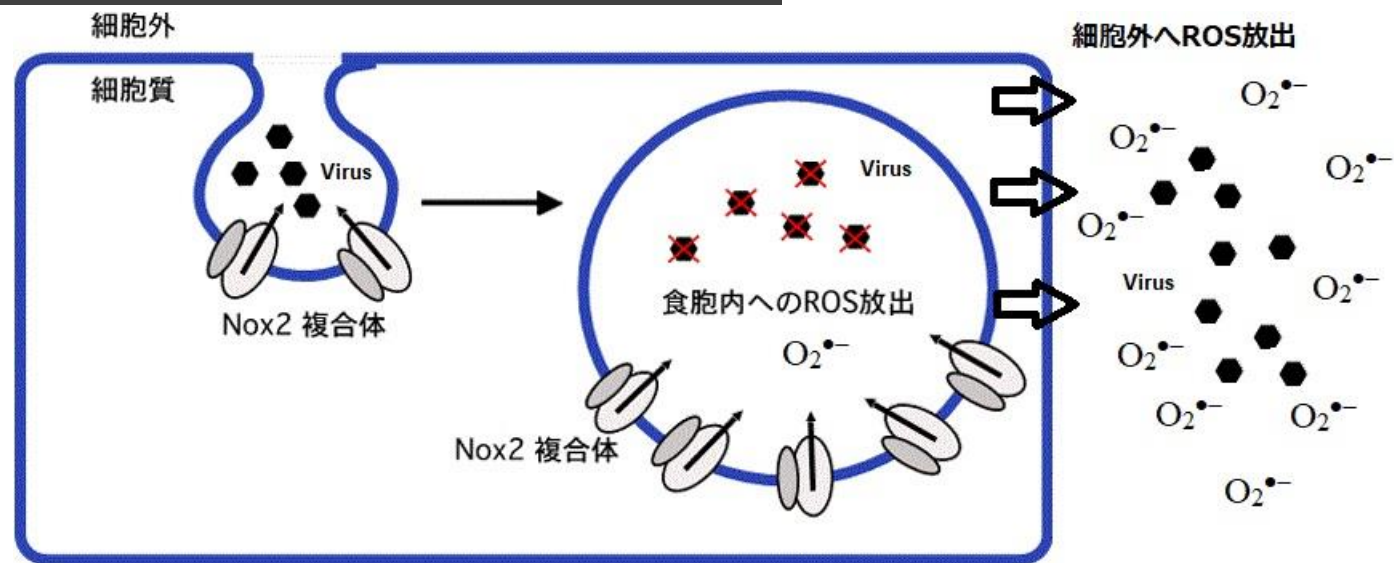
専門: 電気化学・量子化学・計算化学 (*in silico* 創薬/Linux server)

- 酸素/スーパーオキシド ($O_2 / O_2^{\cdot-}$) の電子移動解析
- 医薬品・生体分子等と $O_2^{\cdot-}$ の反応性解析

抗ウイルス薬の作用機序



免疫によるウイルス分解



多量のウイルス
活性酸素プールの中で
抗ウイルス薬は作用する

参) 日本免疫学会、理化学研究所

マクロファージや好中球

O₂^{•-}によるaviganの分解機構精密解析

Methods

- 電子移動解析
- 電解分光法
- ab initio計算



ACS Omega 2021, 6, 33, 21730–21740

Tatsushi Nakayama, Ryo Honda

4th Int. Webinar Phy.H., N.C. COVID-19 Mn.

- O₂^{•-}によりaviganが酸化分解
- 分解反応の熱力学・速度論的パラメーター
- 構造—分解性 相関

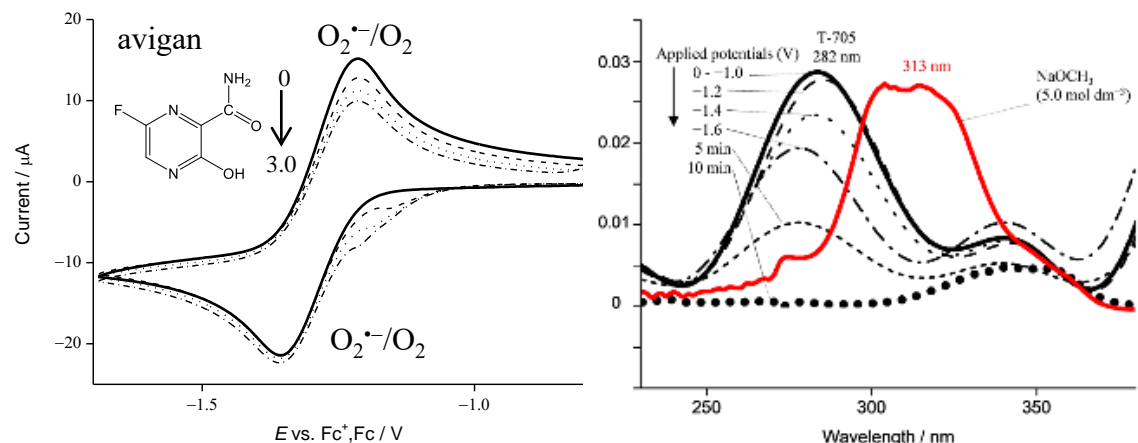
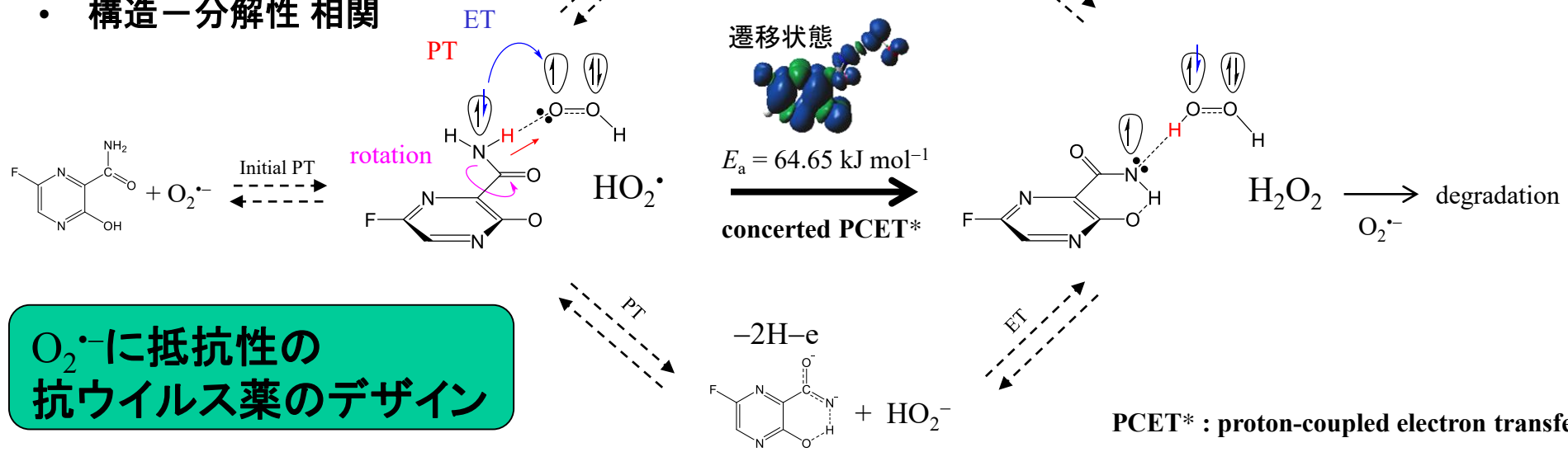
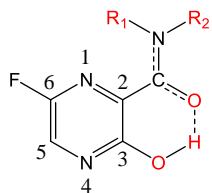


Fig. (L) Cyclic voltammograms of O₂ in the presence of avigan in DMF containing 0.1 mol dm⁻³ TPAP, recorded with a GC electrode. **(R)** UV-vis spectral changes in avigan (1.0 × 10⁻³ mol dm⁻³) solutions in the absence (black) and presence (red) of CH₃ONa and in situ electrolytic spectra in the presence of saturated O₂.



O₂^{•-}に抵抗性の
抗ウイルス薬のデザイン

抗ウイルス薬の開発

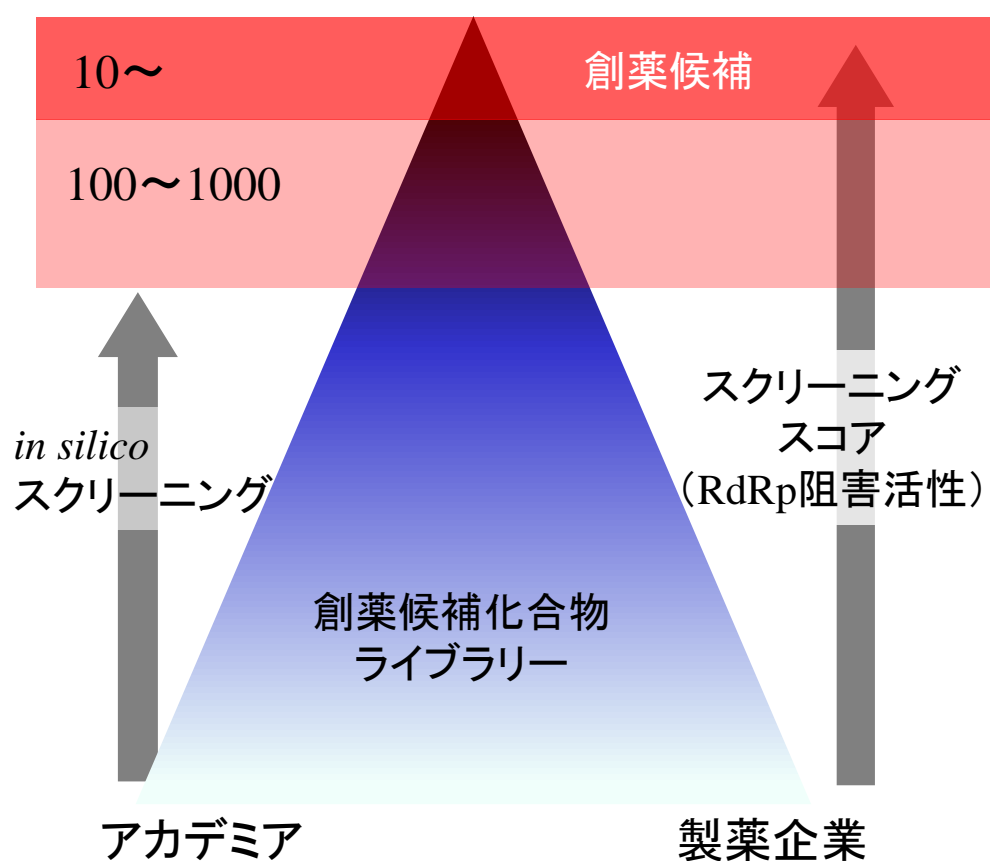


RdRp阻害

+

炎症器官での
低分解性

- ウイルス近傍の滞留時間の増加
- 低用量で免疫炎症器官でも高効果



抗活性酸素・低分解性に着目した
抗ウイルス薬の開発

その他、電極生成した $O_2^{\cdot-}$ との反応性解析

研究パートナー、協力企業を探しています。
宜しくお願い申し上げます。