

## S11-3 創薬ブースター：ヒットからリードへの創薬化学における革新的なアプローチ

○モーブレイ チャールズ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>DNDi

NTD 創薬ブースターは、皮膚リユーシマニア症を引き起こす *Leishmania donovani* やシャーガス病の元となる *Trypanosoma cruzi* といったキネトプラスト類の寄生虫に対する新規ヒット化合物やリード化合物の構造活性相関を、短時間で効率良く解明するために組織された画期的な共同体である。本共同研究においては、各製薬会社の広範な化合物ライブラリーを共同で繰り返し検索するプロセスに、最新のインシリコスクリーニング法を導入した。NTD Booster が革新的と言えるのは、一連の有望な化合物の化学構造および生物活性といった効率的な開発に欠くことのできない情報を、製薬会社が DNDi と同時にかつ事前に共有することにある。

上で述べたユニークな共同研究は、これまでの hit-to-lead では検討されてこなかったスキャッフオールドホッピングや化合物の系統による違いに関して示唆を与えたりすると同様に、迅速な構造活性相関解析を可能にしてきたことをお示しする。また、各社化合物ライブラリー間の重複に関する興味ある知見や会社ごとに異なったインシリコスクリーニングのアプローチがもたらす利点をご紹介します、それぞれの会社が所有する化合物ライブラリーを並行して繰り返し検索することがいかに有用であるかを確認する。