
特命助教	李 峰	Assistant Professor	Feng Li (Ph.D.)
技術補佐員	沢井 裕佑	Assistant	Yusuke Sawai

◇研究目的

当推進室は、共同利用する実験室を管理するとともに、生薬・方剤エキスやその含有有効成分と活性の情報の提供、および生薬をはじめとする天然薬物に関する科学研究を通して、共同利用・共同研究の推進を支援することを目的とする。

◇活動概要

1) 生薬エキスの化学的プロファイリングおよびその情報の提供、生薬の化学成分の研究

当推進室で作成している120種の生薬エキスについて、LC-MSなどを利用して化学的プロファイリングを実施している。また、各生薬エキスの化学的プロファイリング結果を、研究者が閲覧できるように和漢薬データベースに掲載している。

2) バーコードシステムで生薬・方剤エキスの管理

本推進室、または本研究所内で作成した生薬・方剤エキスについて、バーコードデータベースにそれらの抽出原植物名、購入先、抽出方法、保管場所など詳細な情報と共にサンプルIDを登録している。また、生薬・方剤エキスは-20度の冷凍庫に保存し、生薬エキスのバーコードによる管理も実施している。

3) 生薬エキスとその含有成分の提供

当推進室で作成した120種の生薬エキスとその生薬由来成分96種の提供をすることにより、共同利用・共同研究の推進を支援している。

◇原著論文

- 1) Yamashita T., Uehara S., Udagawa N., Li F., Kadota S., Esumi H., Kobayashi Y., Takahashi N.: Arctigenin inhibits osteoclast differentiation and function by suppressing both calcineurin-dependent and osteoblastic cell-dependent NFATc1 pathways. *PLoS One*. 9(1): e85878, 2014.
- 2) Zhang H. Y., Yamakawa Y., Matsuya Y., Toyooka N., Tohda C., Awale S., Li F., Kadota S., Tezuka Y.: Synthesis of long-chain fatty acid derivatives as a novel anti-Alzheimer's agent. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 24(2): 604-608, 2014.
- 3) Kato M., He Y. M., Dibwe D. F., Li F., Awale S., Kadota S., Tezuka Y.: New guaian-type sesquiterpene from *Wikstroemia indica*. *Nat. Prod. Commun.*, 9(1): 1-2, 2014.
- 4) Awale S., Kato M., Dibwe D. F., Li F., Miyoshi C., Esumi H., Kadota S., Tezuka Y.: Antiausterity activity of arctigenin enantiomers: importance of (2R,3R)-absolute configuration. *Nat. Prod. Commun.*, 9(1): 79-82, 2014.
- 5) Niu Y., Li F., Inada C., Tanaka K., Watanabe S., Fujiwara H., Sasaki-Hamada S., Oka J., Matsumoto K.: Chemical profiling with HPLC-FTMS of exogenous and endogenous chemicals susceptible to the administration of chotosan in an animal model of type 2 diabetes-induced dementia. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 104: 21-30, 2015.

◇学会報告 (*: 特別講演, シンポジウム, ワークショップ等)

- 1) 李峰, 田中謙, 渡辺志朗, 手塚康弘: Monoterpenoid Glucoindole Alkaloids from the Roots of *Dipsacus asper*. 日本薬学会第134年会, 2014, 3, 27-30, 熊本.
- 2) Yamashita T., Uehara S., Udagawa N., Li F., Kadota S., Esumi H., Kobayashi Y., Takahashi N.: Arctigenin Inhibits Osteoclastogenesis by Suppressing Both Calcineurin-Dependent and Osteoblastic Cell-Dependent NFATc1 Pathways. American Society for Bone and Mineral Research (ASBMR) 2014 Annual Meeting, September 12-15, 2014, Houston, USA.
- 3) 山下照仁, 小林泰浩, 上原俊介, 宇田川信之, 李峰, 門田重利, 江角直之抗: 炎症作用を持つアルクチゲニンの破骨細胞抑制メカニズム. 第35回日本炎症・再生医学会, 2014, 7, 1-4, 沖縄.
- 4) Liu Y., Li F., Fujiwara H., Tanaka K., Watanabe S., Sasaki-Hamada S., Oka J.: Chemical profiling of endogenous and exogenous markers of chitosan in an animal model of diabetes. 第31回和漢医薬学会, 2014, 8, 30-31, 千葉.
- 5) ハルディアンティベッセ, 李峰, 横山悟, 済木育夫, 早川芳弘: Identification of novel anti-inflammatory compounds from *Moru alba* Linne by targeting NF- κ B. 第31回和漢医薬学会, 2014, 8, 30-31, 千葉.
- 6) 松本欣三, 牛一民, 稲田千香子, 藤原博典, 李峰, 田中謙, 渡辺志朗, 浜田幸恵, 岡淳一郎: 釣藤散投与により脳内に出現する生薬由来分子と生体内分子: 2型糖尿病モデルマウスでのex vivoケミカルプロファイリング解析. 第13回日本臨床中医薬学会, 2014, 12, 6, 大阪.

国際共同研究分野

Division of International Cooperative Researches

客員教授	Rungpetch C. Sakulbumrungsil	Professor	Rungpetch C. Sakulbumrungsil (Ph.D)
特命准教授	梅寄 雅人	Associate Professor	Masahito Umezaki (Ph.D.)
技術補佐員	池原 達郎	Assistant	Tatsuro Ikehara

◇研究目的

民族薬物研究センター国際共同研究部では、バイオ・ケモインフォマティクスを利用して和漢医薬・民族薬物について研究を進めている。特に、コンピュータシミュレーションである量子化学計算や分子動力学計算を利用して、和漢薬有効成分の解析に応用し、その分子構造と生理活性との量子化学的な相関性を明らかにしようとするものである。ほかに、ゲノム研究などのバイオインフォマティクスの成果である様々な生体物質に関する情報を利用して、和漢薬有効成分の作用機序を明らかにする研究を実施している。さらに、これらの研究成果をデータベース化し情報発信も実施していく。

また、伝統薬物・薬用植物に関する国際的共同研究の推進を目的に、Chulalongkorn Universityとの共同研究拠点 (International Collaboration Center for Conservation and Efficient Utilization of Medicinal Resources) 事業を展開している。

◇研究概要

I) バイオ・ケモインフォマティクスを利用した和漢薬成分の解析

- 1) 和漢薬成分の量子化学計算手法を用いた解析
- 2) 和漢薬成分の立体構造データベースの構築

II) 和漢医薬学におけるゲノム解析の応用

- 1) 和漢薬成分とヒトタンパク質の結合解析シミュレーション
- 2) コンピュータシミュレーションによる、和漢薬成分の作用機序解析

III) 中国産生薬・薬用植物の成分、薬理作用ならびに品質評価に関する研究

- 1) 生薬・薬用植物の成分研究
- 2) 生薬・薬用植物の薬理作用研究
- 3) 生薬・薬用植物の分析研究

◇原著論文

- 1) Minehira D., Takeda D., Miyawaki S., Kato A., Adachi I., Miyazaki A., Miyatake R., Umezaki M., Miura K., Kitahara Y., Sugimoto K., Matsuya Y., Toyooka N.: Synthesis and Evaluations of GLP-1 Secretion and Anti-Diabetic Effect in KKAY Mice of New Tricyclic Compounds. *Heterocycles*, 90: 372-404, 2015.
- 2) Wang X., Hayashi S., Umezaki M., Yamamoto T., Kageyama-Yahara N., Kondo T., Kadowaki M.:

Shikonin, a constituent of *Lithospermum erythrorhizon* exhibits anti-allergic effects by suppressing orphan nuclear receptor Nr4a family gene expression as a new prototype of calcineurin inhibitors in mast cells. *Chem Biol Interact.*, 224C: 117-127, 2014.

- 3) Phantipa Sakthong, Phattrapa Suksanga, Rungpetch Sakulbumrungsil, Win Winit-Watjana: Development of Patient-reported Outcomes Measure of Pharmaceutical Therapy for Quality of Life (PROMPT-QoL): A novel instrument for medication management. *Research in Social and Administrative Pharmacy, Res Social Adm Pharm.* pii: S1551-7411(14)00332-5. doi: 10.1016/j.sapharm.2014.10.002, 2014.
- 4) Tanita Thaweethamcharoen, Rungpetch Sakulbumrungsil, Cherdchai Nopmaneejumruslers, Somkiat Vasuvattakul: Cost-Utility Analysis of Erythropoietin for Anemia Treatment in Thai End-Stage Renal Disease Patients with Hemodialysis. *Value Health*, 3: 44-49, 2014.
- 5) Piyameth Dilokthornsakul, Nathorn Chaiyakunapruk, Piyarat Nimpitakpong, Napawan Jeanpeerapong, Katechan Jampachaisri, Todd A Lee: Understanding medication oversupply and its predictors in the outpatient departments in Thailand. *BMC Health Services Research* 14:408, doi: 10.1186/1472-6963-14-408, 2014.
- 6) Phantipa Sakthonga, Win Winit-Watjanab, Rungpetch Sakulbumrungsil: Understanding the medication experiences of Thai patients attending a medication therapy management clinic. *Thai J. Pharm. Sci.*, 38(1): 1-56, 2014.
- 7) Phantipa Sakthong, Rungpetch Sakulbumrungsil, Win Winit-Watjana: Development of Patient-reported Outcomes Measure of Pharmaceutical Therapy for Quality of Life (PROMPT-QoL): A novel instrument for medication management. *Res. Social Adm. Pharm.*, pii: S1551-7411(14)00332-5. doi: 10.1016/j.sapharm.2014., 2014.

◇特許

- 1) 特開 2014-134504 : 「試料解析装置, 試料解析方法, 及び試料解析プログラム」
春木 孝之, 紺野 勝弘, 梅寄 雅人

◇学会報告

- 1) 梅寄雅人, 鈴木哲, 沢井裕佑, 錦織広昌, 小野慎: 超分子系を考慮したシアノバクテリア光化学系における励起遷移の考察, 第5回日本光合成学会年会, 2014, 5, 30-31, 奈良.
- 2) 鈴木哲, 梅寄雅人, 沢井裕佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ; シアノバクテリアの PSII 型反応中心における励起エネルギー移動の考察, 第22回「光合成セミナー2014: 反応中心と色素系の多様性」, 2014, 7, 12-13, 名古屋.
- 3) 沢井裕佑, 鈴木哲, 梅寄雅人, 錦織広昌, 小野慎: 光合成系の構成要素としてのキノン類の基底及び励起電子状態の考察, 第22回「光合成セミナー2014: 反応中心と色素系の多様性」, 2014, 7, 12-13, 名古屋.
- 4) 沢井裕佑: アンテナ系色素複合体における B850 超分子系の励起状態計算, 日本化学会情報化学部会主催 第2回若手の会, 2014, 11, 29, 東京.
- 5) 梅寄雅人, 沢井裕佑, 佐久間勉: PPAR の活性調節に対するリン酸化の影響, 日本薬学会第135回年会, 2015, 3, 25-28, 神戸.
- 6) 鈴木哲, 梅寄雅人, 沢井裕佑, 錦織広昌, 小野慎: 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ; 紅色光合成細菌における B800-850 周辺アンテナ系の光励起遷移の考察, 日本化学会第95春季年会, 2015, 3, 26-29, 千葉.

◇共同研究

国内

- 1) 立川仁典：横浜市立大学 大学院国際総合科学研究科，「和漢薬有効成分の量子化学的計算による解析」，2011, 4～
- 2) 春木孝之：富山大学工学部，「和漢薬有効成分と標的タンパク質の分子動力的解析」，2011, 9～
- 3) 小野慎：金沢工業大学，「コンピュータケミストリーによる分子設計支援」，2011, 10～
- 4) 鈴木哲：信州大学名誉教授，「光合成系のエネルギー遷移に関する解析」，2012, 1～
- 5) 阿部隆：新潟大学 大学院自然科学研究科，「ヒトタンパク質の立体構造予測に関する研究」，2012, 11～
- 6) 山西芳裕：九州大学高等研究院，「和漢薬及び生薬含有由来化合物のターゲット候補タンパク質探索」，2014, 4～
- 7) 五斗進：京都大学化学研究所，「和漢薬及び生薬含有化合物のクラスタリング解析」，2015, 1～

◇非常勤講師

- 1) 梅寄雅人：放送大学面接授業「初歩からのパソコン」2014, 5, 10-11, 富山.
- 2) 梅寄雅人：放送大学面接授業「初歩からのパソコン」2014, 10, 25-26, 富山.

◇活動事業実績

北京大学薬学院との共同研究拠点事業

和漢医薬学総合研究所は北京大学医学部と 2005 年に「薬用資源研究における国際協力拠点設置に関する協定」を結び，双方に International Cooperative Center Office (ICCO) を設けた。その後 2010 年に再締結し，ICCO を拠点として学術交流を行っている。次に 2014 年の活動実績を列記する。

1) 学術交流

- ・2014年2月24日：薬学院の郭 敏杰副院長、蔡 少青教授及び王 璇教授が当研究所を訪問し，共同研究について打合せを行った。蔡 少青教授は，「中薬サイシンの鑑定研究と鼻腔投与によるサイシンの有効物質の探索」と題して講演を行った。
- ・2014年3月10日～11日：和漢医薬学総合研究所神経機能学分野の東田千尋准教授が北京大学薬学院を訪問し，「Natural medicine study aiming to explore therapeutic strategies for neurodegenerative disease」と題して講演を行った。

2) 合同調査

- ・2014年9月20日～24日：小松かつ子教授（生薬資源科学分野）及び蔡 少青教授（北京大学薬学院）が四川省で，秦艽の資源調査を実施した。

(文責：小松 かつ子)