

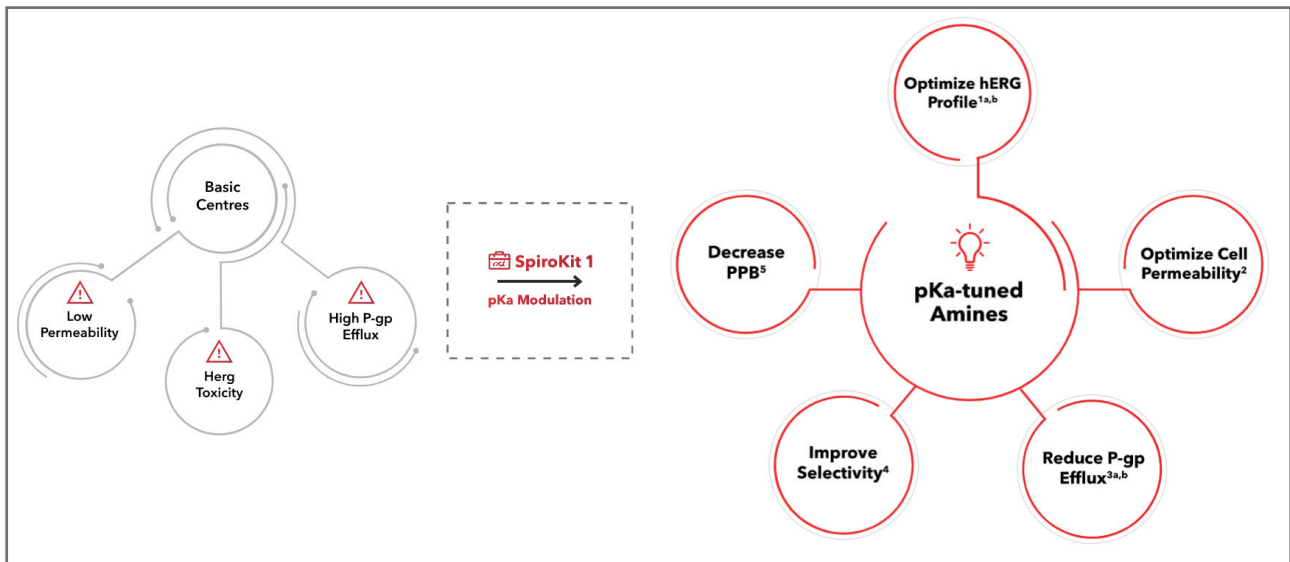
# SpiroKit 1

## SpiroKit 1 : pKa チューニングできるアミン

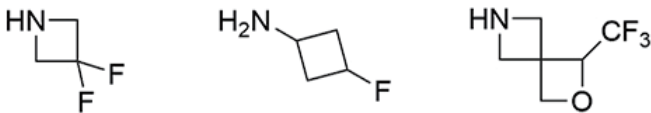
創薬分子に含まれる塩基性アミンは、生理的 pH においてイオン化されやすく、脂溶性が低くなり、膜透過性や経口吸収性にも影響を及ぼすと考えられています。

さらに塩基性分子は、hERG の阻害を招き、 $\alpha$ -酸性糖たんぱく質と強く結合することにより血漿中の遊離薬物濃度を低下させます。

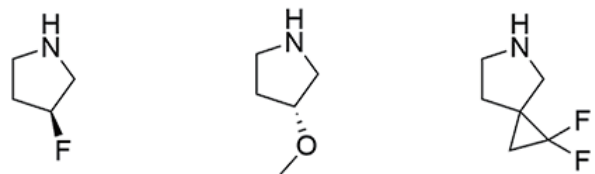
SpiroKit1 は azetidine 等の窒素含有複素環化合物の誘導体から構成されており、これらの誘導体を創薬分子の一部と置き換えることで pKa を自在に調整することが可能です。この調整により、hERG 阻害や細胞浸透性の問題を最適化することができます。



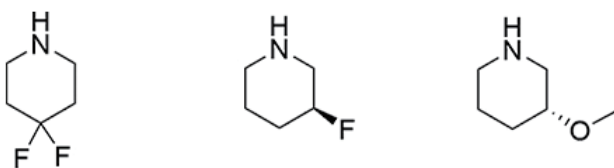
### SPIROKIT 1a : アゼチジン類縁体



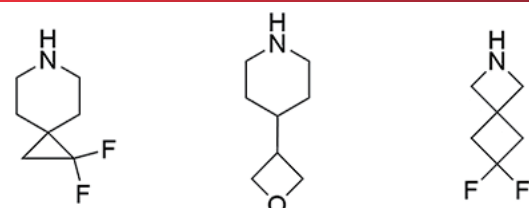
### SPIROKIT 1b : ピロリジン類縁体



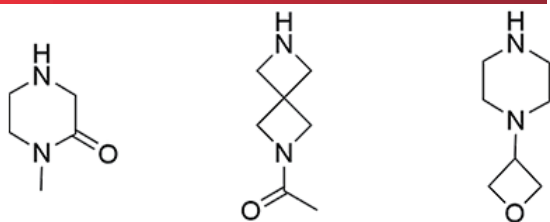
### SPIROKIT 1c : ピペリジン類縁体 ～スターターセット～



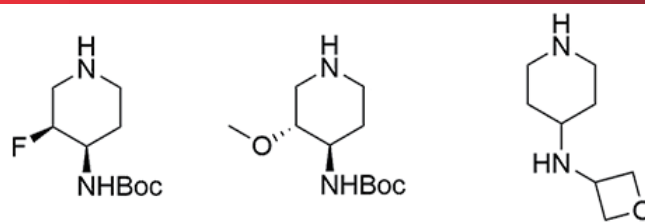
### SPIROKIT 1d : ピペリジン類縁体 ～アドバンスセット～



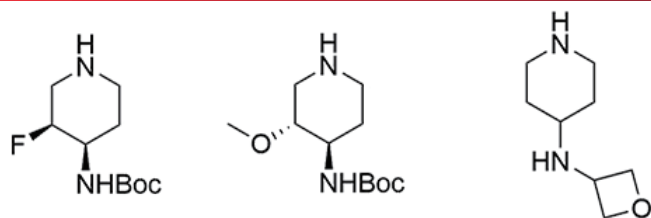
### SPIROKIT 1e : ピペラジン類縁体



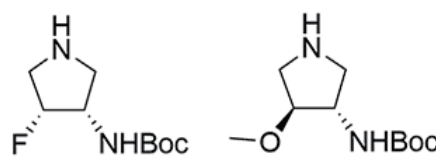
### SPIROKIT 1f : 4-アミノ-ピペリジン類縁体



### SPIROKIT 1g : 3-アミノ-ピペリジン類縁体



### SPIROKIT 1h : 3-アミノ-ピロリジン類縁体



#### 関連文献、特許公報：

Optimize hERG Profile

*Journal of Medicinal Chemistry* **2006**, 49(17), 5029-5046

*Journal of Medicinal Chemistry* **2012**, 55(15), 6916-6933

Cell permeability

*Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2007**, 17, 1043-1046

P-gp efflux

*J. Med. Chem.* **2015**, 58, 401-418

*J. Med. Chem.* **2011**, 54, 2529-2591

Improve selectivity

*Sci. Rep.* **2019**, 9, 19344

Decrease PPB

*Journal of Pharmaceutical Sciences* **2013**, 102(9), 2953-2994



詳細情報やお問い合わせはこちらから



重松貿易株式会社 化学品部  
Shigematsu & Co., Ltd.

<大阪本社>

〒541-0047 大阪市中央区淡路町 2 丁目 2 番 5 号

TEL : (06)6231-6146 FAX : (06)6231-6149

<つくばライフサイエンスオフィス>

〒300-2655 茨城県つくば市万博公園西 F26 街区 1 インプレス 103

TEL : (029)848-3220 FAX : (029)848-3221

WEB : [www.shigematsu-bio.com/](http://www.shigematsu-bio.com/) Mail : [info@shigematsu-bio.com](mailto:info@shigematsu-bio.com)