

# 創薬懇話会 2019 in 秋保 プログラム

6月20日(木) 1日目

12:00～13:00	受付	
13:00～13:10	開会・ご案内(土井 隆行、大澤宏祐)	
13:10～14:00	招待講演1 児玉 栄一(東北大学災害研・院医・大学病院・ToMMo) アカデミアで創薬研究を継続させるヒント	座長: 徳山 英利 (東北大院薬)
14:00～14:50	招待講演2 西谷 陽一(協和発酵キリン株式会社) 表現型創薬で得られた化合物の作用機序解析	座長: 岩淵 好治 (東北大院薬)
14:50～15:10	休憩 (20分)	
15:10～16:00	招待講演3 田中 大輔(Exscientia 株式会社) Re-energising Small Molecule Drug Discovery by Centaur Chemist™	座長: 山口 雅彦 (東北大院薬)
16:00～16:50	招待講演4 松嶋 雄司(アステラス製薬株式会社) 創薬環境の変化と最近の創薬トレンド	座長: 小野寺 秀幸 (協和発酵キリン)
16:50～17:05	休憩 (15分)	
17:05～17:10	創薬懇話会2020開催案内(大野 浩章)	
17:10～18:00	招待講演5 有本 博一(東北大院生命科学) オートファジーに基づく創薬の可能性	座長: 大野 浩章 (京大院薬)
18:20～19:00	ポスター発表 奇数	
19:00～20:20	夕食・休憩	
20:20～21:00	ポスター発表 偶数	
21:00～	交流会	

6月21日(金) 2日目

8:50～9:40	招待講演6 市原 収(シュレーディングー株式会社) レセプターの水和解析と自由エネルギー計算を活用したリガンド最適化戦略	座長: 土井 隆行 (東北大院薬)
9:40～10:30	招待講演7 梅津 光央(東北大院工) ライブラリーデザインサイクルを用いたタンパク質設計: 規模の拡大を狙わない進化分子工学	座長: 吉村 祐一 (東北医科薬科大薬)
10:30～10:45	休憩 (15分)	
10:45～11:15	表彰式・閉会(土井 隆行)	
11:30～	解散・仙台駅へ送迎(バス)	

(敬称略)

# 目 次

## 招 待 講 演

- 【招待講演 1】 座長：徳山 英利（東北大院薬）  
「アカデミアで創薬研究を継続させるヒント」  
（東北大災害研・院医・大学病院・ToMMo）児玉 栄一 . . . 1
- 【招待講演 2】 座長：岩淵 好治（東北大院薬）  
「表現型創薬で得られた化合物の作用機序解析」  
（協和発酵キリン株式会社 低分子医薬研究所）西谷 陽一 . . . 3
- 【招待講演 3】 座長：山口 雅彦（東北大院薬）  
「Re-energising Small Molecule Drug Discovery by Centaur Chemist™」  
（Exscientia 株式会社）田中 大輔 . . . 5
- 【招待講演 4】 座長：小野寺 秀幸（協和発酵キリン（株））  
「創薬環境の変化と最近の創薬トレンド」  
（アステラス製薬株式会社）松嶋 雄司 . . . 7
- 【招待講演 5】 座長：大野 浩章（京大院薬）  
「オートファジーに基づく創薬の可能性」  
（東北大院生命科学）有本 博一 . . . 9
- 【招待講演 6】 座長：土井 隆行（東北大院薬）  
「レセプターの水和解析と自由エネルギー計算を活用したリガンド最適化戦略」  
（シュレーディングー株式会社）市原 収 . . . 11
- 【招待講演 7】 座長：吉村 祐一（東北医科薬科大薬）  
「ライブラリーデザインサイクルを用いたタンパク質設計：  
規模の拡大を狙わない進化分子工学」  
（東北大院工）梅津 光央 . . . 13

## ポスター発表

- P-1 環状歪みアルキンの発生を伴うウラシル骨格の新規縮環反応の開発  
(<sup>1</sup>立命館大薬、<sup>2</sup>名城大薬)○上田祥平<sup>1</sup>(D2)、林巧実<sup>1</sup>、武永尚子<sup>2</sup>、土肥寿文<sup>1</sup> . . . 15
- P-2 分子状酸素を用いた銅触媒 C(sp<sup>3</sup>)-H 結合酸素官能基化反応の開発  
(<sup>1</sup>東北大院薬)○松澤雄太<sup>1</sup>(M1)、熊田佳菜子<sup>1</sup>、根東義則<sup>1</sup> . . . 16
- P-3 HSiEt<sub>3</sub>/I<sub>2</sub>を用いたアルキンの触媒的還元反応による(Z)-アルケン  
合成法の開発  
(<sup>1</sup>東北大院薬)○野口小都<sup>1</sup>(M1)、熊田佳菜子<sup>1</sup>、根東義則<sup>1</sup> . . . 17
- P-4 Fenchone 骨格を選択的に与える hydroxy-pinene 類の Prins /  
semipinacol 転位カスケード反応とその計算化学的考察  
(<sup>1</sup>UC Berkeley, <sup>2</sup>UC Davis)○長澤 翔太<sup>1</sup>, Marcus Blümel<sup>1</sup>, Katherine Blackford<sup>1</sup>,  
Stephanie R. Hare<sup>2</sup>, Dean J. Tantillo<sup>2</sup>, Richmond Sarpong<sup>1</sup> . . . 18
- P-5 高度縮合多環式ユズリハアルカロイド・カリシフィリン A の合成研究  
(東北大院薬)○小山純平(D2)、井口かおり、笹野裕介、叶直樹、岩淵好治 . . . 19
- P-6 生物活性分子へのプロパルギル単位導入反応の開発とその応用  
(<sup>1</sup>東北大院薬、<sup>2</sup>星薬科大医薬研)○藤木翔吾<sup>1</sup>(M2)、岡村俊孝<sup>1</sup>、岩淵好治<sup>1</sup>、  
叶 直樹<sup>1,2</sup> . . . 20
- P-7 銅塩の利用を基点とする、タンパク質化学合成を指向した反応開発研究  
(徳島大学薬学部)○小林大志朗(M1)、成瀬公人、重永 章、大高 章 . . . 21
- P-8 がん抑制因子 PHB2 の部分配列を基盤とした乳がん阻害ペプチドの開発  
(<sup>1</sup>徳島大院薬、<sup>2</sup>徳島大先端酵素研)○安養寺啓太央<sup>1</sup>(M1)、栗飯原圭佑<sup>1</sup>、  
吉丸哲郎<sup>2</sup>、重永章<sup>1</sup>、片桐豊雅<sup>2</sup>、大高章<sup>1</sup> . . . 22
- P-9 新規ジスルフィド架橋試薬を利用した効率的固相ジスルフィドペプチド  
合成法の開発  
(東京薬大・薬)○小林清孝(D3)、田口晃弘、崔 岩、志田 颯、高山健太郎、  
谷口敦彦、林 良雄 . . . 23

P-10	<b>ヒト IgG 抗体 Fc 部位結合ペプチドの C 末端残基に着目をした構造活性相関研究</b> ( <sup>1</sup> 東京薬大薬、 <sup>2</sup> 鹿児島大院理工) ○福田 茜(D1) <sup>1</sup> 、六車 共平 <sup>1</sup> 、伊藤 真由 <sup>1</sup> 、藤田 好珠 <sup>1</sup> 、坂本 宗一郎 <sup>1</sup> 、岸本 聡 <sup>2</sup> 、田口 晃弘 <sup>1</sup> 、高山 健太郎 <sup>1</sup> 、谷口 敦彦 <sup>1</sup> 、伊東 祐二 <sup>2</sup> 、林 良雄 <sup>1</sup> . . .	24
P-11	<b>Foxo3a 阻害活性を示す JBIR-141 の合成研究</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬、 <sup>2</sup> 産総研、 <sup>3</sup> 筑波大数理物質) ○八十島浩太郎 <sup>1</sup> (D1)、新家一男 <sup>2</sup> 、吉田将人 <sup>3</sup> 、土井隆行 <sup>1</sup> . . .	25
P-12	<b>構造活性相関研究を指向した JBIR-126 の全合成</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬、 <sup>2</sup> 筑波大数理物質、 <sup>3</sup> 産総研) ○大山皓介 <sup>1</sup> (D3)、吉田将人 <sup>2</sup> 、新家一男 <sup>3</sup> 、土井隆行 <sup>1</sup> . . .	26
P-13	<b>パラジウム/キラルアミン共触媒を用いたアルキン-エナール化合物のエナンチオ選択的付加・環化反応の開発</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬、 <sup>2</sup> 横浜薬大薬) ○伊藤和也 <sup>1</sup> (D3)、塚本裕一 <sup>1,2</sup> 、土井隆行 <sup>1</sup> . . .	27
P-14	<b>多様性拡大抽出物を用いたテルペノイドアルカロイド型化合物群の構築</b> (東北大院薬) ○中野静香(M1)、河合航輔、菅原章公、大島吉輝、菊地晴久. . .	28
P-15	<b>構造多様性を指向したケイ素原子含有メロテルペノイド様化合物群の創出</b> (東北大院薬) ○宮有希(M1)、菅原章公、前野勝光、大島吉輝、菊地晴久. . .	29
P-16	<b>創薬シーズ探索研究支援の推進</b> (東京大学 創薬機構) ○小島宏建 . . .	30
P-17	<b>塩素原子欠損型 pericosine E 類縁体の合成</b> ( <sup>1</sup> 大阪薬大、 <sup>2</sup> 明治薬大) ○樋口萌 <sup>1</sup> (B6)、神吉真緒 <sup>1</sup> (B5)、山本瑞季 <sup>1</sup> 、植沢芳広 <sup>2</sup> 、永井純子 <sup>2</sup> 、米山弘樹 <sup>1</sup> 、春沢信哉 <sup>1</sup> 、宇佐美吉英 <sup>1</sup> . . .	31
P-18	<b>Pericoxide 両エナンチオマーの合成</b> (大阪薬大) ○伊集院昌以(B6)、溝渕慶乃(B4)、米山弘樹、春沢信哉、宇佐美吉英 . . .	32
P-19	<b>アミドの還元的アリル化反応の開発と天然物合成への応用</b> (東北大院薬) ○下村誠志(D1)、板橋優、坂田樹理、徳山英利 . . .	33

P-20	<b>Acochlearine の合成研究</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬)○宮本尚也 <sup>1</sup> (D3)、藤岡孝佑 <sup>1</sup> 、岡野健太郎 <sup>1</sup> 、坂田樹理 <sup>1</sup> 、徳山英利 <sup>1</sup> .....	34
P-21	<b>(-) -Deoxoapodine の全合成</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬)○岡田康佑 <sup>1</sup> (M2)、吉田慶、植田浩史、徳山英利 .....	35
P-22	<b>(+) -epilupinine の 3 工程不斉全合成</b> (徳島大院薬)○堤大洋(D1)、Karanjit Sangita、中山淳、難波康祐 .....	36
P-23	<b>天然マクロライドの全合成が拓く新規多発性骨髄腫治療薬</b> ( <sup>1</sup> 徳島大薬、 <sup>2</sup> 徳島大院薬、 <sup>3</sup> 徳島大院歯、 <sup>4</sup> 徳島大院医)○浜田麻衣 <sup>1</sup> (B6)、 森崎巧也 <sup>2</sup> 、中山淳 <sup>2</sup> 、寺町順平 <sup>3</sup> 、辻大輔 <sup>2</sup> 、重永章 <sup>2</sup> 、山本武範 <sup>2</sup> 、篠原康雄 <sup>2</sup> 、 大高章 <sup>2</sup> 、伊藤孝司 <sup>2</sup> 、安部正博 <sup>4</sup> 、難波康祐 <sup>2</sup> .....	37
P-24	<b>Calyciphylline G の全合成研究</b> ( <sup>1</sup> 徳島大院薬、 <sup>2</sup> 徳島大院医歯薬研究部)○亀山周平 <sup>1</sup> (M1)、坂本光 <sup>1</sup> 、中山淳 <sup>2</sup> 、 難波康祐 <sup>2</sup> .....	38
P-25	<b>抗がん活性を有する 9-デオキシキセニアラクトール C の合成研究</b> (東北医薬大薬)○佐々木里菜(M1)、佐藤廣河、成田紘一、吉村祐一、渡邊一弘 .....	39
P-26	<b>超原子価ヨウ素とジフェニルジセレニドを用いた含窒素複素環化合物の 合成法の開発</b> (東北医薬大薬)○鈴木 郁(M1)、名取 良浩、萬 浩太、若松 秀章、斎藤 有香子、 吉村 祐一 .....	40
P-27	<b>複合アルコキシド塩基による電子豊富な芳香族複素環化合物の直接的 カルボキシル化反応</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬)○花坂和也 <sup>1</sup> (M1)、佐々木慶太 <sup>1</sup> 、重野真徳 <sup>1</sup> 、根東義則 <sup>1</sup> .....	41
P-28	<b>系内発生アミド塩基による触媒的アリル位炭素—水素での脱プロトン化 カップリング反応</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬)○梶間慧玖 <sup>1</sup> (M1)、中路国仁、重野真徳、根東義則 .....	42
P-29	<b>芳香族求電子置換反応によるアゾベンゼンのオルト位 C-H ホウ素化反応</b> ( <sup>1</sup> 東北大院薬)○今松将也 <sup>1</sup> (M1)、甲斐佑典 <sup>1</sup> 、重野真徳 <sup>1</sup> 、根東義則 <sup>1</sup> .....	43
P-30	<b>生体深部の 2 価鉄検出を指向した<sup>19</sup>F-MRI プローブの開発</b> (岐阜薬大薬化学)○垣内亮(M1)、平山祐、辻美恵子、永澤秀子 .....	44