

## ポスター発表 1 (11月28日) (1P-01 ~ 1P-47)

- 一般口頭発表 12:40 ~ 13:55、14:25 ~ 15:15 (テルサホール)
  - ※ ◆ 印は、一般口頭発表者。ショートオーラルプレゼンテーションはありません。
- ショートオーラルプレゼンテーション 16:35 ~ 17:30 (テルサホール)
- ポスター討論 17:30 ~ 19:00 (東館2F: セミナー室 / 東館3F: 大会議室)

### A: 新規創薬技術 (モダリティ)

- 1P-01 抗体のエフェクター能を正・負に制御する中分子  
(九大院工) ○森健, 佐々木光一, 原田美乃里, 岸村顕広, 片山佳樹
  
- 1P-02  $\beta$ -アミノ酸を組み込んだ新規コラーゲン模倣物の創製  
(<sup>1</sup> 芝浦工大院理工, <sup>2</sup> 帝京大薬) ○下田茜<sup>1</sup>, 伊東未祐<sup>1</sup>, 上村光<sup>1</sup>, 杉山亨<sup>2</sup>, 橘高敦史<sup>2</sup>, 須原義智<sup>1</sup>

### D: リード探索・化合物ライブラリ

- ◆ 1P-03 多様化するスクリーニングに合わせたライブラリ戦略  
(田辺三菱製薬株式会社) ○狩野弘樹
  
- 1P-04 ケイ素官能基をリンカー構造とするビスフェノール誘導体の構造物性相関と選択的エストロゲン受容体モジュレーターへの展開  
(東大定量研) ○松本雄一朗, 橋本祐一, 藤井晋也
  
- 1P-05 ホスフィノフェノール構造を基盤とする含リン化合物の構造物性相関と生物活性化合物への応用  
(東大定量研) ○齊藤広樹, 松本雄一朗, 橋本祐一, 藤井晋也
  
- 1P-06 スピロ含ホウ素複素環化合物の新規合成法の開発と *in vitro* 薬物動態評価  
(関西大学化学生命工) ○夏谷格, 山井悠介, 石田恭次, 長岡康夫, 住吉孝明
  
- 1P-07 モルヒネ非感受性  $\mu$  オピオイド受容体スプライスバリエント選択的作動薬を志向したモルヒナン誘導体の合成  
(<sup>1</sup> 北里大薬, <sup>2</sup> 東北医科薬科大薬) ○本城綾香<sup>1</sup>, 米澤佑<sup>2</sup>, 御代田彩乃<sup>1</sup>, 平山重人<sup>1</sup>, 唐木文霞<sup>1</sup>, 伊藤謙之介<sup>1</sup>, 溝口広一<sup>2</sup>, 藤井秀明<sup>1</sup>
  
- 1P-08  $\delta$  オピオイド受容体インバースアゴニストを志向した *N*-置換基の検討  
(<sup>1</sup> 北里大薬, <sup>2</sup> 昭和大薬) ○岩松千晴<sup>1</sup>, 早川大地<sup>2</sup>, 河野友美<sup>1</sup>, 柴崎麻莉恵<sup>1</sup>, 東永華<sup>1</sup>, 平山重人<sup>1</sup>, 合田浩明<sup>2</sup>, 藤井秀明<sup>1</sup>

1P-09 鎮痛作用を有する新規かご型オピオイドペプチド化合物の合成研究

(<sup>1</sup> 室工大院工, <sup>2</sup> 東北医薬大薬) ○岸里涼太<sup>1</sup>, 櫻田忍<sup>2</sup>, 溝口広一<sup>2</sup>, 林貴史<sup>2</sup>, 関千草<sup>1</sup>, 上井幸司<sup>1</sup>, 奥山祐子<sup>2</sup>, 中野博人<sup>1</sup>

◆ 1P-10 生合成経路の再構築と再設計による糸状菌ジテルペノイドピロンライブラリーの構築と生物活性評価

(<sup>1</sup> 東大院総合文化, <sup>2</sup> 東北大院薬, <sup>3</sup> 東北大院医, <sup>4</sup> 金沢大院医薬保, <sup>5</sup> 京大院農, <sup>6</sup> 国衛研) ○塚田健人<sup>1,2</sup>, 金子秋穂<sup>1</sup>, 新木翔之<sup>1</sup>, 河治久実<sup>3</sup>, 児玉栄一<sup>3</sup>, 倉石貴透<sup>4</sup>, 村上一馬<sup>5</sup>, 入江一浩<sup>5</sup>, 平田尚也<sup>6</sup>, 諫田泰成<sup>6</sup>, 浅井禎吾<sup>1</sup>

E: 物性・動態・安全性

1P-11 細胞膜高透過性ペプチドフォルダマーの開発と核酸デリバリーへの応用

(<sup>1</sup> 国立衛研, <sup>2</sup> 長崎大院医歯薬) ○三澤隆史<sup>1</sup>, 大岡伸通<sup>1</sup>, 大庭誠<sup>2</sup>, 田中正一<sup>2</sup>, 内藤幹彦<sup>1</sup>, 出水庸介<sup>1</sup>

1P-12 対称分子構造を非対称構造とする化学修飾を用いた低分子化合物の水溶性向上策

(<sup>1</sup> 東大定量研, <sup>2</sup> 東大院薬, <sup>3</sup> 理研, <sup>4</sup> 日大医) ○森本淳基<sup>1</sup>, 宮本和範<sup>2</sup>, 市川裕樹<sup>1</sup>, 内山真伸<sup>2,3</sup>, 槇島誠<sup>4</sup>, 橋本祐一<sup>1</sup>, 石川稔<sup>1</sup>

1P-13 iPS細胞由来心筋細胞からなる三次元心筋組織体を用いたハイスループット心毒性評価システムの開発

(<sup>1</sup> 関西大化学生命工, <sup>2</sup> 阪大院生命) ○恒川晴子<sup>1</sup>, 塚本佳也<sup>2</sup>, 住吉孝明<sup>1</sup>, 赤木隆美<sup>2</sup>, 長岡康夫<sup>1</sup>, 明石満<sup>2</sup>

F: ケミカルバイオロジー

1P-14 CFA 型 EGFR 不可逆阻害剤のターゲット選択性評価

(<sup>1</sup> 九大院薬, <sup>2</sup> 名大 ITbM) ○佐藤磨美<sup>1</sup>, 進藤直哉<sup>1</sup>, 湊田大和<sup>1</sup>, 渡公佑<sup>1</sup>, 柴田智博<sup>1</sup>, 桑田啓子<sup>2</sup>, 小野眞弓<sup>1</sup>, 王子田彰夫<sup>1</sup>

1P-15 Ligand and Target Discovery by Fragment-Based Screening in Human Cells

(<sup>1</sup> TSRI, <sup>2</sup> 小野薬品工業, <sup>3</sup> EPFL, <sup>4</sup> BMS) ○佐々木健二<sup>1,2</sup>, Christopher G. Parker<sup>1</sup>, Andrea Galmozzi<sup>1</sup>, Yujia Wang<sup>1</sup>, Bruno Correia<sup>3</sup>, Christopher Joslyn<sup>1</sup>, Cullen Cavallaro<sup>4</sup>, Michael Lawrence<sup>4</sup>, Enrique Saez<sup>1</sup>, Benjamin F. Cravatt<sup>1</sup>

1P-16 Caged oncometabolite 類の開発と機能評価

(名市大院薬) ○本部竜馬, 川口充康, 家田直弥, 中川秀彦

1P-17 穏やかな反応基を利用した高選択的 BTK プローブの開発

(九大院薬) ○進藤直哉, 佐藤磨美, 徳永啓佑, 湊田大和, 王子田彰夫

1P-18 レチノイドX受容体ホモダイマー選択的アンタゴニストの創出  
(<sup>1</sup>岡山大院医歯薬, <sup>2</sup>日大医, <sup>3</sup>静岡県大食品) ○渡邊将貴<sup>1</sup>, 中山真理子<sup>1</sup>, 山田翔也<sup>1</sup>, 藤原美智子<sup>1</sup>, 西井緑<sup>1</sup>, 榎島誠<sup>2</sup>, 川崎真由<sup>3</sup>, 中野祥吾<sup>3</sup>, 伊藤創平<sup>3</sup>, 加来田博貴<sup>1</sup>

1P-19 ウンベリフェロン構造を有する蛍光性レチノイドX受容体リガンドの創出と結合試験への応用  
(<sup>1</sup>岡山大院医歯薬, <sup>2</sup>アイバイオズ株式会社, <sup>3</sup>静岡県大食品) 山田翔也<sup>1</sup>, ○藤原美智子<sup>1,2</sup>, 渡邊将貴<sup>1</sup>, 川崎真由<sup>3</sup>, 中野祥吾<sup>3</sup>, 伊藤創平<sup>3</sup>, 加来田博貴<sup>1</sup>

## G: バイオフィジックス

1P-20 X線結晶構造及び相互作用解析に基づく蛍光性RXR $\alpha$ アゴニスト作用機序の解明  
(<sup>1</sup>静岡県大食品, <sup>2</sup>岡山大院医歯薬総合, <sup>3</sup>立教大理) ○川崎真由<sup>1</sup>, 中野祥吾<sup>1</sup>, 本山智晴<sup>1</sup>, 山田翔也<sup>2</sup>, 渡邊将貴<sup>2</sup>, 藤原美智子<sup>2</sup>, 常盤広明<sup>3</sup>, 加来田博貴<sup>2</sup>, 伊藤創平<sup>1</sup>

## G: 創薬実践 (ケーススタディー)

1P-21 *N*- $\omega$ -フェニルアルキルピペリジン類の抗腫瘍活性発現構造の解析  
(<sup>1</sup>北医療大薬, <sup>2</sup>松山大薬, <sup>3</sup>福山大薬) ○波多江典之<sup>1</sup>, 久次米永子<sup>2</sup>, 木塚真美<sup>1</sup>, 芦田莉那<sup>1</sup>, 町支臣成<sup>3</sup>, 西山卓志<sup>3</sup>, 岡田知晃<sup>1</sup>, 岩村樹憲<sup>2</sup>, 吉村昭毅<sup>1</sup>

1P-22 ベータラクタム抗菌薬の活性を増強する天然物 bulgecin A-C の合成と生物活性評価  
(ノートルダム大学) ○友重秀介, David A. Dik, 赤羽-中田昌明, Chinedu S. Madukoma, Jed F. Fisher, Joshua D. Shrout, Shahriar Mobashery

◆ 1P-23 Activity-Based Protein Profiling (ABPP) を用いた ABHD12 選択的阻害薬の創製および ABHD12 の生体内機能の解明  
(<sup>1</sup>The Scripps Research Institute, <sup>2</sup>Abide Therapeutics) ○小笠原大介<sup>1</sup>, Taka Aki-Ichu<sup>1</sup>, Vincent Vartabedian<sup>1</sup>, Jacqueline Benthuyssen<sup>1</sup>, Alex Reed<sup>2</sup>, Olesya Ulanovskaya<sup>2</sup>, Jonathan J. Hulce<sup>1</sup>, Amanda Roberts<sup>1</sup>, Steven Brown<sup>1</sup>, Hugh Rosen<sup>1</sup>, John R. Teijaro<sup>1</sup>, Benjamin F. Cravatt<sup>1</sup>

1P-24 スフィンゴシンキナーゼ阻害剤開発を目指した Jaspine B 誘導体の合成と構造活性相関研究  
(<sup>1</sup>京大院薬, <sup>2</sup>近畿大薬) ○宮川貴吏<sup>1</sup>, 井貫晋輔<sup>1</sup>, 本田真歩<sup>1</sup>, 中村真也<sup>2</sup>, 仲西功<sup>2</sup>, 藤井信孝<sup>1</sup>, 大石真也<sup>1</sup>, 大野浩章<sup>1</sup>

1P-25 抗がん薬を指向した新規 SPT 阻害薬の創薬研究  
(武田薬品工業) ○小島拓人, 浅野恭臣, 倉澤修, 平田泰啓, 岩村直輝, Tzu-Tshin Wong, 齊藤文内, 田中雄太, 荒井良介, 米森和子, 宮本泰史, 鷺谷洋司, 矢口正宏, 柴田早智雄, 水谷明生, 佐野修, 安達竜太郎, 里見佳典, 平山愛, 青山和誠, 日浦悠斗, 木場篤司, 北村周治, 今村真一

- 1P-26 ポリ ADP リボース集積活性を有する抗がん剤候補 M02455 の同定と構造活性相関  
(<sup>1</sup> 工学院大先進工, <sup>2</sup> 熊本保健福祉大, <sup>3</sup> 神奈川工科大,  
<sup>4</sup> 長大院医歯薬フロンティア生命科学, <sup>5</sup> 国立がんセンター研, <sup>6</sup> 都立駒込病院,  
<sup>7</sup> 静岡県大院薬, <sup>8</sup> 熊大院薬, <sup>9</sup> ファルマバレーセンター) ○松野研司<sup>1</sup>, 橋本知子<sup>1</sup>,  
小林寛幸<sup>1</sup>, 大野修<sup>1</sup>, イスラムラフィクル<sup>2</sup>, 大川原正<sup>2</sup>, 高村岳樹<sup>3</sup>, 佐々木由香<sup>4,5</sup>,  
小野寺貴恵<sup>4,5</sup>, 藤森浩彰<sup>4,5</sup>, 小泉史朗<sup>6</sup>, 下山達<sup>6</sup>, 澤田武志<sup>6</sup>, 秋元茉莉<sup>6</sup>, 石川吉伸<sup>7</sup>,  
入江徹美<sup>8</sup>, 井上謙吾<sup>9</sup>, 益谷美都子<sup>4,5</sup>
- 1P-27 アトピー性皮膚炎が引き起こす慢性掻痒の治療薬を目指した GRPR 阻害薬の開発  
(マルホ株式会社) ○寶来侑平, 田原照之, 鈴木孫一, 羽下裕二, 阪田昌弘, 野澤直樹,  
交久瀬磨耶子, 榎本愛, 高原淳一, 内橋伸介, 清水卓也, 向山洋平
- 1P-28 疎水性ファーマコフォアとしてカルボランを導入した新規 NAMPT 阻害剤の開発  
(<sup>1</sup> 東工大化生研, <sup>2</sup> 東京理科大薬, <sup>3</sup> ㈱理論創薬研究所) ○浅輪泰允<sup>1</sup>, 葛城肅貴<sup>2</sup>, 佐藤聡<sup>2</sup>,  
吉森篤史<sup>3</sup>, 田沼靖一<sup>2</sup>, 中村浩之<sup>1</sup>
- 1P-29 KLK7 阻害薬の構造活性相関  
(<sup>1</sup> アスビオファーマ㈱, <sup>2</sup> 第一三共㈱, <sup>3</sup> 第一三共 RD ノバーレ㈱) ○村藤秀宣<sup>1,2</sup>,  
菅原肇<sup>1,2</sup>, 後藤恵<sup>1,2</sup>, 小山嘉晃<sup>1,3</sup>, 坂井啓紀<sup>1,2</sup>, 今城精一<sup>1</sup>, 友尾敏幸<sup>1,2</sup>, 武藤毅<sup>1,2</sup>
- 1P-30 ピラゾールをヘム配位性テンプレートとした高選択的アルドステロン合成酵素 (CYP11B2)  
阻害薬の創製  
(田辺三菱製薬㈱) ○榊原良, 佐々木渉, 恩田勇一, 山口南実, 後河内秀樹, 平賀由起,  
佐藤可奈子, 西尾将史, 江木康陽, 武富啓, 清水秀俊, 大洞倫子, 赤星文彦
- 1P-31 ファーストインクラス抗がん薬を指向した高活性および高選択性を有する  
新規 GCN2 阻害薬の創薬研究  
(<sup>1</sup> 武田薬品工業株式会社, <sup>2</sup> Takeda California, Inc.) ○倉澤修<sup>1</sup>, 藤本潤<sup>1</sup>, 高木輝文<sup>1</sup>,  
劉シン<sup>1</sup>, 坂野浩<sup>1</sup>, 小島拓人<sup>1</sup>, 浅野恭臣<sup>1</sup>, 中村鑑斗<sup>1</sup>, 南部忠洋<sup>1</sup>, 秦彬斗<sup>1</sup>,  
石井剛<sup>1</sup>, 鮫島知哉<sup>1</sup>, 出堀泰之<sup>1</sup>, 宮本真紀<sup>1</sup>, Michael G. Klein<sup>2</sup>, Richard Tjhen<sup>2</sup>,  
Bi-Ching Sang<sup>2</sup>, Irena Levin<sup>2</sup>, Scott Weston Lane<sup>2</sup>, Gyorgy P. Snell<sup>2</sup>, Ke Li<sup>2</sup>,  
Georgia Kefala<sup>2</sup>, Isaac D. Hoffman<sup>2</sup>, Steve C. Ding<sup>2</sup>, キャリーダグラス R<sup>1</sup>,  
溝尻亮<sup>1</sup>
- ◆ 1P-32 プロスタグランジン E<sub>2</sub> 受容体に対するデュアル作動薬 (ONO-8055) の創製  
(小野薬品工業㈱) ○木下晶博, 東野勝人, 吉田孝司, 荒谷祥之, 角内章人, 花田圭介,  
武田博之, 松屋秀和, 大元和之
- 1P-33 経口吸収性の向上を指向したレニン阻害薬の最適化研究 : SCO-272 (TAK-272) の創製  
(<sup>1</sup> 武田薬品工業株式会社, <sup>2</sup> 武田カリフォルニア) ○徳原秀和<sup>1</sup>, 今枝泰宏<sup>1</sup>, 深瀬嘉之<sup>1</sup>,  
岩永幸一<sup>1</sup>, 田家直博<sup>1</sup>, 渡部浩史<sup>1</sup>, 金川玲<sup>1</sup>, 松田圭介<sup>1</sup>, 梶本祐美子<sup>1</sup>, 楠本啓司<sup>1</sup>,  
近藤光代<sup>1</sup>, Gyorgy Snell<sup>2</sup>, Craig A. Behnke<sup>2</sup>, 黒板孝信<sup>1</sup>

- 1P-34 リゾホスファチジルセリン受容体アゴニストのサブタイプ選択性獲得に必要な分子構造の探索  
(<sup>1</sup> 東大院薬, <sup>2</sup> 東北大院薬) ○井久保仁也<sup>1</sup>, 佐山美紗<sup>1</sup>, 陳露瑩<sup>1</sup>, Mian Wu<sup>1</sup>, ジョンセジン<sup>1</sup>, 中村翔<sup>1</sup>, 尾谷優子<sup>1</sup>, 上水明治<sup>2</sup>, 井上飛鳥<sup>2</sup>, 青木淳賢<sup>2</sup>, 大和田智彦<sup>1</sup>
- 1P-35 リードスルー活性向上をめざしたネガマイシン誘導体 3 位アミノ基部の構造活性相関研究  
(東京薬大薬) ○大村紀子, 濱田圭佑, 田口晃弘, 新井実咲, 高山健太郎, 谷口敦彦, 林良雄
- 1P-36 Indoleamine 2,3-dioxygenase 阻害剤の合成および結合様式の解明  
(<sup>1</sup> 工学院大先進工, <sup>2</sup> 静岡県大院薬, <sup>3</sup> 国立研究開発法人日本医療研究開発機構, <sup>4</sup> 国立研究開発法人国立長寿医療センター) ○手嶋真武<sup>1</sup>, 熊澤美幸<sup>1</sup>, 武田翔太<sup>1</sup>, 鈴木健二<sup>1</sup>, 水本友紀子<sup>1</sup>, 橋本知子<sup>1</sup>, 浅井章良<sup>2</sup>, 滝川修<sup>3,4</sup>, 大野修<sup>1</sup>, 松野研司<sup>1</sup>
- 1P-37 新規ユビキチン活性化酵素阻害薬の創製  
(京府医大院医) ○伊藤幸裕, 鈴木美紀
- ◆ 1P-38 経口投与可能な TRH ミメティック Rovatirelin Hydrate の創製  
(<sup>1</sup> 塩野義製薬, <sup>2</sup> シオノギテクノアドバンスリサーチ, <sup>3</sup> アラガンジャパン) ○小林尚武<sup>1</sup>, 佐藤準人<sup>1</sup>, 藤村木綿子<sup>1</sup>, 木原毅<sup>1</sup>, 杉田勝二<sup>1</sup>, 高橋浩次<sup>2</sup>, 小池勝己<sup>1</sup>, 菅原民雄<sup>1</sup>, 多田幸男<sup>1</sup>, 中井博<sup>1</sup>, 吉川剛兆<sup>3</sup>
- 1P-39 インドリルマレイミド誘導体の開発とラット虚血再灌流障害モデルにおける心保護効果  
(<sup>1</sup> 理研, <sup>2</sup> AMED-CREST, <sup>3</sup> JST-ERATO, <sup>4</sup> 東北大多元研) ○中尾周平<sup>1,2</sup>, 寺山直樹<sup>1,2</sup>, 闌闌孝介<sup>1,2,3,4</sup>, 清水忠<sup>1,4</sup>, 井内勝哉<sup>1,3</sup>, 高橋昌弘<sup>4</sup>, 袖岡幹子<sup>1,2,3,4</sup>
- 1P-40 Dimer 型構造を有する PD-1/PD-L1 結合阻害薬の SAR 研究  
(日本たばこ産業(株)医薬総合研究所) ○川下誠司, 青柳幸一, 山中浩, 判谷理恵, 成岡詩織, 堀裕治, 豊永幸代, 福島響子, 谷本敦男, 判谷吉嗣, 宮崎将
- 1P-41 CD28 シグナル阻害作用に基づくフェノタイプアッセイによる最初の BET 阻害剤の発見  
(田辺三菱製薬(株)) ○遠藤淳一, 氷川英正, 濱田真以子, 石渕正剛, 藤江直人, 田中実, 菅原邦夫, 尾下浩一, 岩田和憲, 大池進介, 村田還, 千葉健治, 安達邦知
- 1P-42 アミロイドβを創薬標的としたプロアントシアニジン誘導体の開発  
(昭和大学薬学部) ○水野美麗, 森一憲, 柴沼質子, 福原潔
- 1P-43 金属錯体形成をトリガーとした新規抗酸化物質の開発  
(<sup>1</sup> 昭和薬大, <sup>2</sup> 放医研, <sup>3</sup> 国衛研) ○福原潔<sup>1</sup>, 今井耕平<sup>1</sup>, 中西郁夫<sup>2</sup>, 松本謙一郎<sup>2</sup>, 大野彰子<sup>3</sup>

## I : 合成方法論

- 1P-44 新規 SGLT2 阻害薬開発を目指した 1-置換カルバグルコース誘導体の多様性指向型合成  
(<sup>1</sup> 岐阜大工, <sup>2</sup> 山形大院理工, <sup>3</sup> カフルエルシェイク大獣医, <sup>4</sup> 愛工大工) ○喜多村徳昭<sup>1</sup>,  
岩井千織<sup>1</sup>, 長屋奈那子<sup>1</sup>, 上田浩<sup>1</sup>, 片桐洋史<sup>2</sup>, Mahmoud Kandeel<sup>3</sup>, 池田将<sup>1</sup>, 北出幸夫<sup>1,4</sup>
- 1P-45 含窒素五環性天然物マクレアニンの合成研究  
(名大院創薬) ○窪小谷和宏, 清水貴央, 秋元健太, 福山透, 横島聡
- 1P-46 抗ウイルス薬候補化合物 EdAP の合成  
(<sup>1</sup> 東理大理工, <sup>2</sup> 麻布大獣医, <sup>3</sup> 横浜薬科大薬) ○鎌田真衣<sup>1</sup>, 竹内倫文<sup>1</sup>, 櫻庭彩子<sup>1</sup>, 林瑛<sup>1</sup>,  
友重秀介<sup>1</sup>, 紙透伸治<sup>2</sup>, 菅原二三男<sup>1</sup>, 大類洋<sup>3</sup>, 倉持幸司<sup>1</sup>
- 1P-47 鉄触媒による不斉酸化反応を用いたエソメプラゾールのプロセス開発  
(<sup>1</sup> 東和薬品, <sup>2</sup> 大地化成, <sup>3</sup> 理研, <sup>4</sup> 東大院理) ○西口茂信<sup>1</sup>, 泉拓洋<sup>1</sup>, 河野高慶<sup>2</sup>,  
助川潤平<sup>1</sup>, イリエシュラウレアン<sup>3,4</sup>, 中村栄一<sup>4</sup>

## ポスター発表 2 (11月29日) (2P-01 ~ 2P-47)

■一般口頭発表 9:00 ~ 10:15 (テルサホール)

※ ◆ 印は、一般口頭発表者。ショートオーラルプレゼンテーションはありません。

■ショートオーラルプレゼンテーション 11:05 ~ 11:55 (テルサホール)

■ポスター討論 13:25 ~ 14:55 (東館2F: セミナー室 / 東館3F: 大会議室)

### B: インシリコ・IT 基盤

2P-01 構造ジェネレーターを活用した化合物デザイン

(旭化成ファーマ) ○山口貴也, 芹沢貴之, 鷹羽健一郎, 大川和史

2P-02 国産無償創薬ソフトウェア myPresto を使った結合自由エネルギー  $\Delta G$  の推算

(<sup>1</sup>天然物組合, <sup>2</sup>情報数理バイオ, <sup>3</sup>日立ソリューションズ東日本, <sup>4</sup>molprof (産総研))  
○真下忠彰<sup>1,2</sup>, 黒澤隆<sup>1,3</sup>, 福西快文<sup>1,4</sup>

### C: バイオフィジックス

2P-03 シグナル伝達分子 Grb2 SH2 ドメインと CD28 由来ペプチド複合体の水素原子の可視化を目指した高分解能結晶構造解析

(<sup>1</sup>医科歯科大, <sup>2</sup>京府大, <sup>3</sup>JASRI, <sup>4</sup>東京理科大) ○沼本修孝<sup>1</sup>, 細江雄飛<sup>2</sup>, 稲葉理美<sup>2,3</sup>, 小川修平<sup>4</sup>, 森井尚之<sup>1</sup>, 安部良<sup>4</sup>, 織田昌幸<sup>2</sup>, 伊藤暢聡<sup>1</sup>

2P-04 SHG スクリーニングを用いた高選択的な新規 ITK 阻害剤のヒット探索

(<sup>1</sup>JT 医薬総合研究所, <sup>2</sup>Biodesy, Inc.) ○飯尾清誠<sup>1</sup>, 判谷吉嗣<sup>1</sup>, 判谷理恵<sup>1</sup>, 梅谷佳代<sup>1</sup>, 佐藤俊宏<sup>1</sup>, 菊若優信<sup>1</sup>, Tracy Young<sup>2</sup>, Katelyn Connell<sup>2</sup>, Sam Kintz<sup>2</sup>, Joshua Salafsky<sup>2</sup>

2P-05 新規代謝センサー分子 CtBP2 のアミノ酸配列に基づく分子設計と構造・物性評価

(<sup>1</sup>立教大理, <sup>2</sup>AMED-CREST, <sup>3</sup>静岡県大食品, <sup>4</sup>医科歯科大難治研, <sup>5</sup>筑波大医)  
○宮下由里奈<sup>1,2</sup>, 山本雄大<sup>1</sup>, 中野祥吾<sup>3</sup>, 伊藤創平<sup>3</sup>, 沼本修孝<sup>4</sup>, 伊倉貞吉<sup>4</sup>, 伊藤暢聡<sup>4</sup>, 関谷元博<sup>5</sup>, 島野仁<sup>5</sup>, 常盤広明<sup>1,2</sup>

### D: リード探索・化合物ライブラリ

2P-06 新規骨格を有する HIF-1 阻害剤の発見と作用機序解析

(東工大化生研) ○植田大樹, 中村浩之

2P-07 シリコンスイッチによるケイ素含有天然物様骨格の創出

(東北大院薬) ○菅原章公, 前野勝光, 宮有希, 大島吉輝, 菊地晴久



2P-08 Investigation of the chemical space for brain penetrable, carboxylic acid-containing compounds: expanding the area available for CNS drug discovery (1 Neurology business group, Eisai Co., Ltd., 2 hhc data creation center, Eisai Co., Ltd., 3 Medicine development center, Eisai Co., Ltd.) ○大橋芳章<sup>1</sup>, 長谷川大樹<sup>1</sup>, 小竹真<sup>1</sup>, 黒川利樹<sup>1</sup>, 西岡大貴<sup>2</sup>, 櫛田郁雄<sup>3</sup>, 吉葉孝子<sup>3</sup>, 望月俊樹<sup>3</sup>, 山本正枝<sup>3</sup>, 小森高文<sup>3</sup>, 吉田融<sup>1</sup>, 武田邦稔<sup>1</sup>, 寺内太朗<sup>1</sup>

2P-09 Humulene 骨格を基盤としたアザ中員環含有テルペノイドアルカロイド型化合物群の創出 (東北大院薬) ○志賀皓介, 西村壮央, 菅原章公, 大島吉輝, 菊地晴久

#### E: 物性・動態・安全性

2P-10 中分子シクロデキストリンを基盤とした難治性脂質蓄積症治療薬の開発 (1 熊本大院薬, 2 熊本大学リーディング大学院 HIGO プログラム, 3 熊本大薬, 4 熊本大生命資源研究支援セ, 5 熊本大発生医学研) ○前田有紀<sup>1,2</sup>, 西山怜奈<sup>1</sup>, 本山敬一<sup>1</sup>, 東大志<sup>1</sup>, 小野寺理沙子<sup>3</sup>, 中潟直己<sup>4</sup>, 香月博志<sup>1</sup>, 入江徹美<sup>1,2</sup>, 江良択実<sup>5</sup>, 有馬英俊<sup>1,2</sup>

2P-11 癌特異的酵素活性を利用した新規キノンメチドプロドラッグの開発 (1 東大院薬, 2 東大院医, 3 京都府医大院消化器外科, 4 JST さきがけ, 5 AMED CREST) ○林健人<sup>1</sup>, 神谷真子<sup>2,4</sup>, 久保秀正<sup>3</sup>, 浦野泰照<sup>1,2,5</sup>

#### F: ケミカルバイオロジー

2P-12 DNA 修復酵素 OGG1 阻害剤 SU0268 の創製 (Stanford 大学) ○田原優樹, Eric T. Kool

2P-13 マイオスタチン阻害を目指したペプチド-光酸素化触媒コンジュゲートの開発 (東京薬大薬) ○岡本英之, 谷口敦彦, 宇佐美翔哉, 田口晃弘, 高山健太郎, 林良雄

2P-14 新規呼吸鎖阻害剤によるがん微小環境を標的とした抗がん剤の創薬研究 (微生物化学研究所<sup>1</sup> 第1生物活性研究部,<sup>2</sup> 沼津支所動物施設,<sup>3</sup> 有機合成研究部) ○吉田潤次郎<sup>1</sup>, 雨宮昌秀<sup>1</sup>, 立田大輔<sup>1</sup>, 大石智一<sup>2</sup>, 大庭俊一<sup>2</sup>, 井上裕幸<sup>2</sup>, 阿部光<sup>3</sup>, 渡辺匠<sup>3</sup>, 柴崎正勝<sup>3</sup>, 川田学<sup>1,2</sup>

2P-15 *In situ* Click 反応を基盤とする生細胞中での G4 の可視化 (1 東農工大院工,<sup>2</sup> 公益財団法人がん研究会,<sup>3</sup> Pohang University of Science and Technology) ○安田瑞穂<sup>1</sup>, 馬悦<sup>1</sup>, 岡部幸子<sup>2</sup>, Young-Tae Chang<sup>3</sup>, 清宮啓之<sup>2</sup>, 長澤和夫<sup>1</sup>

2P-16 HMG-CoA 還元酵素の分解を誘導する低分子化合物の構造活性相関とプローブ化 (東大定量研) ○鷲森郁也, 吉岡広大, 橋本祐一, 大金賢司



G : 創薬実践 (ケーススタディー)

2P-17 種差の解消を指向した GPR35 アゴニストの合成研究

(<sup>1</sup>工学院大先進工, <sup>2</sup>岡大院医歯薬, <sup>3</sup>立教大理, <sup>4</sup>京都薬大) ○小出拓人<sup>1</sup>, 渡邊智博<sup>1</sup>, 橋本知子<sup>1</sup>, 橋本直季<sup>1</sup>, 永沼美弥子<sup>1</sup>, 手塚一燈<sup>1</sup>, 赤木荘太<sup>2</sup>, 古田和幸<sup>2</sup>, 山本雄大<sup>3</sup>, 長島颯太<sup>3</sup>, 常盤広明<sup>3</sup>, 田中智之<sup>4</sup>, 大野修<sup>1</sup>, 松野研司<sup>1</sup>

◆ 2P-18 網羅的構造活性相関研究によるマウス由来マイオスタチン阻害ペプチドの高活性化

(東京薬大薬) ○高山健太郎, 浅利知, 齋藤まりこ, 六本木佳美, 中村明里, 嶋田嵩大, 池山弘晃, 田口晃弘, 谷口敦彦, 根岸洋一, 林良雄

2P-19 抗体薬物複合体への適用を指向した抗体結合ペプチドの構造活性相関研究

(<sup>1</sup>東京薬大薬, <sup>2</sup>鹿児島大院理工) ○六車共平<sup>1</sup>, 藤田好珠<sup>1</sup>, 福田茜<sup>1</sup>, 岸本聡<sup>2</sup>, 有間理沙子<sup>1</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>

2P-20 経口活性を有するソマトスタチン受容体サブタイプ2アゴニストの創製

(小野薬品工業株) ○石田昭治, 田嶋洋平, 岡部泰之, 松下岳史, 関口哲也, 今出慧海, 野村佳則, 田中元之, 岡田拓也, 能島梢司, 吉田篤史, 伊代田陽子, 青木彰平, 西尾拓也, 駒形龍哉, 岩城正典, 長縄厚志, 今川昭

2P-21 新規評価手法の構築に基づいた1型リアノジン受容体抑制剤の創製

(<sup>1</sup>医科歯科大生材研, <sup>2</sup>順天堂大医) ○森修一<sup>1</sup>, 飯沼大翔<sup>1</sup>, 間中紀暁<sup>1</sup>, 湯浅磨里<sup>1</sup>, 村山尚<sup>2</sup>, 呉林なごみ<sup>2</sup>, 影近弘之<sup>1</sup>

2P-22 血液脳関門透過性を有するヒストン脱アセチル化酵素阻害剤の探索研究

(<sup>1</sup>関西大化学生命工, <sup>2</sup>帝京大薬, <sup>3</sup>理研, <sup>4</sup>東薬大生命科) ○住吉孝明<sup>1</sup>, 平中誠弥<sup>1</sup>, 手賀悠真<sup>2</sup>, 樋口慧<sup>2</sup>, 黒澤俊樹<sup>2</sup>, 出口芳春<sup>2</sup>, 本間光貴<sup>3</sup>, 新真由美<sup>3</sup>, 伊藤昭博<sup>3,4</sup>, 吉田稔<sup>3</sup>, 長岡康夫<sup>1</sup>

2P-23 骨形成促進作用を有するジフェニルエーテル誘導体の創製

(京都薬品工業株) ○武田滋充, 高橋健司, 庄子幸倫, 伊東佑真, 北尾達哉, 白波瀬弘明

2P-24 イトラコナゾールのNPC1に対するシャペロン作用に着目した構造活性相関研究

(<sup>1</sup>東大定量研, <sup>2</sup>理研) ○安藤有輝<sup>1</sup>, 塩井隆太<sup>1</sup>, 吉岡広大<sup>1</sup>, 谷内出友美<sup>1</sup>, 石川稔<sup>1</sup>, 橋本祐一<sup>1</sup>, 大金賢司<sup>1,2</sup>

2P-25 急性心不全治療薬を指向した短時間作用型sGC活性化剤の創製

(トーアエイヨー株) 高谷昭行, ○伊藤直哉, 岡田直樹, 飯森絵美子, 澤部壽浩, 長坂恒佑, 長坂洋祐, 上元和広

2P-26 ピレンゼピン関連化合物の合成と立体構造の解明

(<sup>1</sup>帝京大薬, <sup>2</sup>東京理大薬, <sup>3</sup>エーザイ株, <sup>4</sup>東大薬) ○金瀬薫<sup>1</sup>, 田畑英嗣<sup>1</sup>, 牧野宏章<sup>2</sup>, 吉永貴志<sup>3</sup>, 忍足鉄太<sup>1</sup>, 夏莉英昭<sup>4</sup>, 高橋秀依<sup>2</sup>

- 2P-27 アデノシン受容体を標的とした不眠症治療薬の開発  
(筑波大学 WPI-IIIIS) ○斉藤毅, 井岡秀二, Mustafa Korkutata, Michael Lazarus, 長瀬博
- 2P-28 非天然型モルフィナン骨格を有する MRGPRX2 リガンドの創出  
(<sup>1</sup> 筑波大院数理物質, <sup>2</sup> 筑波大睡眠研究機構 (WPI-IIIIS)) ○飯尾啓太<sup>1</sup>, 沓村憲樹<sup>2</sup>, 南雲康行<sup>2</sup>, 斉藤毅<sup>2</sup>, 山本直司<sup>2</sup>, 長瀬博<sup>1,2</sup>
- 2P-29 プロピニルオキサジン骨格を有する BACE1 選択的阻害剤の創製: 水分子ネットワークの違いを活用した BACE2 に対する選択性の獲得  
(<sup>1</sup> 塩野義製薬, <sup>2</sup> Janssen Pharmaceutica NV) ○藤本夏月<sup>1</sup>, 吉田周平<sup>1</sup>, 只野元太<sup>1</sup>, 鈴木慎司<sup>1</sup>, 松岡瑛梨子<sup>1</sup>, 山本喬彦<sup>1</sup>, 浅田直也<sup>1</sup>, 安藤茂<sup>1</sup>, 金川直樹<sup>1</sup>, 殿村優<sup>1</sup>, 伊藤久則<sup>1</sup>, Dieder Moechars<sup>2</sup>, Harrie Gijzen<sup>2</sup>, 日下部兼一<sup>1</sup>
- 2P-30 短時間作用型 V2 受容体拮抗剤の創製  
(トーアエイヨー(株)) 大長卓也, ○内野祐次郎, 高谷昭行, 岩崎陽一, 岡田直樹, 伊藤直哉, 長坂洋祐, 飯森絵美子, 大山聡美, 森光二, 鈴木敬, 上元和広
- 2P-31 Transrepression 作用選択的 PPAR  $\gamma$  リガンドの創製を指向した構造活性相関研究  
(<sup>1</sup> 東大定量研, <sup>2</sup> 日本大医) ○豊田洋介<sup>1</sup>, 野村さやか<sup>1</sup>, 槇島誠<sup>2</sup>, 橋本祐一<sup>1</sup>, 石川稔<sup>1</sup>
- 2P-32 トリフルオロメチルチアジン骨格を有する BACE1 阻害剤の創製: 心毒性リスクの低減と共有結合負荷量の検討  
(<sup>1</sup> 塩野義製薬, <sup>2</sup> Janssen Pharmaceutica NV) ○中原健二<sup>1</sup>, 阿南浩輔<sup>1</sup>, 井宗康悦<sup>1</sup>, 鈴木慎司<sup>1</sup>, 山本喬彦<sup>1</sup>, 木戸康人<sup>1</sup>, 金川直樹<sup>1</sup>, 福島民雄<sup>1</sup>, 殿村優<sup>1</sup>, 伊藤久則<sup>1</sup>, 阪口岳<sup>1</sup>, Francois Bischoff<sup>2</sup>, Harrie Gijzen<sup>2</sup>, 日下部兼一<sup>1</sup>
- ◆ 2P-33 世界最強の作用を有する CETP 阻害剤 TA-8995 (obicetrapib) の創製  
(田辺三菱製薬(株)創薬本部) ○林則充, 窪田均, 中村恵宣, 山元康王, 菅原正克, 東島孝典, 大井真利子, 岡幸蔵
- 2P-34 ASIC 阻害剤の合成研究  
(<sup>1</sup> 第一三共, <sup>2</sup> 第一三共 RD ノバーレ) ○藤井邦彦<sup>1</sup>, 中村弘明<sup>1</sup>, 吉田昌生<sup>1</sup>, 梅崎優真<sup>1</sup>, 高野理恵子<sup>1</sup>, 沼田幸伸<sup>1</sup>, 谷本達夫<sup>2</sup>, 脇元聡子<sup>1</sup>, 劉思丹<sup>1</sup>, 泉正憲<sup>1</sup>, 渡邊てるみ<sup>1</sup>, 出口恒夫<sup>1</sup>, 松尾珠代<sup>2</sup>, 平山隆<sup>2</sup>
- 2P-35 p62-Keap1-Nrf2 系を標的とした PPI 阻害剤の肝細胞がん薬剤耐性抑制効果  
(<sup>1</sup> 慶應大薬, <sup>2</sup> 新潟大医, <sup>3</sup> 東北大医, <sup>4</sup> 東大創薬機構) ○安田大輔<sup>1</sup>, 大江知之<sup>1</sup>, 高橋恭子<sup>1</sup>, 一村義信<sup>2</sup>, 小松雅明<sup>2</sup>, 山本雅之<sup>3</sup>, 今村理世<sup>4</sup>, 小島宏建<sup>4</sup>, 岡部隆義<sup>4</sup>, 長野哲雄<sup>4</sup>, 増野匡彦<sup>1</sup>

- 2P-36 オレフィン構造を有する新規 ACG2 選択的阻害剤の創製  
 (1塩野義製薬, 2シオノギテクノアドバンスリサーチ) ○西浦祐二<sup>1</sup>, 松村明<sup>2</sup>,  
 小林尚武<sup>1</sup>, 島崎淳行<sup>1</sup>, 坂本真吾<sup>1</sup>, 北出直久<sup>1</sup>, 殿村優<sup>1</sup>, 井埜章<sup>1</sup>, 奥野隆行<sup>1</sup>
- 2P-37 栄養飢餓耐性解除に基づく膵臓がん治療薬を目指した新規クマリン誘導体合成と活性評価  
 (1富山大院理工, 2富山大院生命融合, 3富山大院医薬, 4岐阜薬科大) ○岡田貴大<sup>1</sup>,  
 高原理行<sup>2</sup>, 岡田卓哉<sup>2</sup>, Suresh Awale<sup>3</sup>, Dya Fita Dibwe<sup>3</sup>, 遠藤智史<sup>4</sup>, 豊岡尚樹<sup>1,2</sup>
- 2P-38 海洋天然物ラメラリン N の構造改変による T790M/C797S 耐性変異 EGFR に有効な  
 可逆型チロシンキナーゼ阻害剤の開発  
 (1長崎大院工, 2長崎大院水環, 3岩手医科大薬, 4がん研化療セ) ○福田勉<sup>1</sup>, 石橋郁人<sup>2</sup>,  
 奥裕介<sup>3</sup>, 西谷直之<sup>3</sup>, 且慎吾<sup>4</sup>, 矢守隆夫<sup>4</sup>, 上原至雅<sup>3</sup>, 岩尾正倫<sup>1</sup>
- 2P-39 架橋構造に注目したキノマイシン系抗生物質の構造展開と生物活性評価  
 (1岐阜薬大, 2岐阜大工) ○小池晃太<sup>1</sup>, 海老原昌弘<sup>2</sup>, 平山祐<sup>1</sup>, 辻美恵子<sup>1</sup>, 永澤秀子<sup>1</sup>
- 2P-40 プロテアソーム  $\beta$  2,  $\beta$  5 デュアル阻害剤の開発研究  
 (北大院薬) ○龍見健吾, 北畑舜, 勝山彬, 薬師寺文華, 市川聡
- 2P-41 小細胞肺がん治療を目的とした SRRM4 を標的とする Gapmer 型アンチセンス核酸の開発  
 (1大阪大学薬学研究科生物有機化学分野, 2医薬基盤健康栄養研究所 (NIBIOHN))  
 ○下條正仁<sup>1</sup>, 笠原勇矢<sup>1,2</sup>, 小比賀聡<sup>1,2</sup>

## I : 合成方法論

- 2P-42 5N-スルホニル-3-メチル-1,5-ベンゾジアゼピン-2-オン類の軸不斉と  
 中心不斉の連動性と癌細胞増殖抑制活性  
 (1帝京大薬, 2(株)アフィニティサイエンス, 3東理大薬, 4東大薬) ○田畑英嗣<sup>1</sup>, 辻侑夏<sup>1</sup>,  
 舟木かおる<sup>1</sup>, 米田哲也<sup>1</sup>, 田坂友彦<sup>2</sup>, 忍足鉄太<sup>1</sup>, 高橋秀依<sup>3</sup>, 夏苺英昭<sup>1,2,4</sup>
- 2P-43 TRPV1 アンタゴニスト活性を有する Voacangine 類の不斉全合成研究  
 (千葉大院薬) ○原口敬佑, 宮路和則, 和田凌太, 浅場絢ヌネツ, 小暮紀行, 北島満里子,  
 高山廣光

## J : 反応開発

- 2P-44 トリアジンジオン骨格を基盤とした種々アルキル化剤の開発  
 (金沢大院医薬保) ○山下莉奈, 藤井崇徳, 藤田光, 山田耕平, 北村正典, 国嶋崇隆
- 2P-45 固相上ジスルフィド形成反応を利用した環状ペプチドの効率的合成法の開発と  
 その自動合成への応用  
 (東京薬大薬) ○田口晃弘, 小林清孝, 崔岩, 高山健太郎, 谷口敦彦, 林良雄

K：低分子構造解析・分析・精製

2P-46 医薬品開発における定量 NMR 法を用いた品質評価  
(塩野義製薬) ○清田浩平, 菊池純子, 佐藤準人

2P-47 北海道白糠町産植物のアミロイド $\beta$ 凝集阻害活性スクリーニングと活性物質の探索  
(室蘭工大院工) ○久保研二, 渡邊輝, 関千草, 中野博人, 徳樂清孝, 上井幸司

## ポスター発表3 (11月29日) (3P-01 ~ 3P-39)

### ■一般口頭発表 9:00 ~ 10:15 (テルサホール)

※ ◆ 印は一般口頭発表者。ショートオーラルプレゼンテーションはありません。

### ■ショートオーラルプレゼンテーション 16:25 ~ 17:05 (テルサホール)

### ■ポスター討論 17:05 ~ 18:35 (東館2F: セミナー室 / 東館3F: 大会議室)

#### A: 新規創薬技術 (モダリティ)

##### 3P-01 正電荷を帯びたグアニン誘導体をもつPNAオリゴマーの合成

(<sup>1</sup> 帝京大薬, <sup>2</sup> 名古屋大 WPI-ITbM, <sup>3</sup> 工学院大工, <sup>4</sup> 国立衛研有機, <sup>5</sup> 国際医療福祉大薬)  
○杉山亨<sup>1</sup>, 柴崎初音<sup>1</sup>, 森谷俊介<sup>1</sup>, 桑田啓子<sup>2</sup>, 今村保忠<sup>3</sup>, 出水庸介<sup>4</sup>, 栗原正明<sup>5</sup>, 橘高敦史<sup>1</sup>

##### 3P-02 複合体化を指向したドラスタチン10誘導体の構造活性相関研究

(東レ株式会社医薬研究所) ○横坂慎也, 伊澤明子, 坂井知津香, 桜田恵里, 盛田康弘, 西尾幸博

##### 3P-03 プロテインキナーゼ指向型ファージ表層提示ペプチドライブラリーの構築

(大阪府大院理) ○藤原大佑, 三原皓典, 中村勇介, 藤井郁雄

##### 3P-04 ウイルスポリメラーゼを標的とした不可逆阻害剤の開発

(<sup>1</sup> 名大院理, <sup>2</sup> 浜松医大医, <sup>3</sup> 国立感染症研究所, <sup>4</sup> 東北大医) ○新美結士<sup>1</sup>, 片倉秀雄<sup>1</sup>, 鈴木哲郎<sup>2</sup>, 村上努<sup>3</sup>, 児玉栄一<sup>4</sup>, 木村康明<sup>1</sup>, 阿部洋<sup>1</sup>

#### B: インシリコ・IT基盤

##### 3P-05 CYP2B6誘導を予測する新規 Structure-Based 3D-QSAR手法の開発

(<sup>1</sup> 田辺三菱製薬(株)創薬本部, <sup>2</sup> 北里大学薬) ○加藤晴敏<sup>1</sup>, 山乙教之<sup>2</sup>, 岩崎紀彦<sup>1</sup>, 岡村茂昭<sup>1</sup>, 久米俊行<sup>1</sup>, 広野修一<sup>2</sup>

##### 3P-06 A newly developed method based on AI-oriented amino acid interaction mapping (AI-AAM) for efficient virtual scaffold hopping

(富士フイルム) ○津村享佑, 大平詩野, 中林淳

##### 3P-07 レプリカ交換傘サンプル法によるエピジェネティクス関連酵素の一次構造選択機構の解明

(<sup>1</sup> 名大院理, <sup>2</sup> 京医大, <sup>3</sup> CREST) ○三嶋浩和<sup>1,3</sup>, 塚本修一郎<sup>1</sup>, 伊藤幸裕<sup>2,3</sup>, 鈴木孝禎<sup>2,3</sup>, 岡本祐幸<sup>1,3</sup>

3P-08 生物活性・溶解度データの Matched Molecular Pair Analysis 自動化

(<sup>1</sup> エルゼビア・ジャパン株式会社, <sup>2</sup> Elsevier BV) ○齋藤美里<sup>1</sup>,  
Frederik van den Broek<sup>2</sup>

3P-09 深層強化学習と CGBVS 法による選択的キナーゼ阻害剤の化学構造生成法

(<sup>1</sup> 理論創薬研, <sup>2</sup> 京都コンステラ) ○吉森篤史<sup>1</sup>, 川崎延蔵<sup>2</sup>, 金井千里<sup>2</sup>

D: リード探索・化合物ライブラリ

3P-10 抗がん薬を指向したジテルペノイドアルカロイド誘導体のヒトがん細胞に対する細胞毒性および構造活性相関の検討

(<sup>1</sup> 北海道科学大薬, <sup>2</sup> ノースカロライナ大学薬) ○和田浩二<sup>1</sup>, 草薙那美<sup>1</sup>, 清水楊洋<sup>1</sup>, 山下浩<sup>1</sup>, 後藤益生<sup>2</sup>, Kuo-Hsiung Lee<sup>2</sup>

3P-11 水中での 1,4-ジヒドロピリジン誘導体の合成とそのサーチチェーン活性評価

(<sup>1</sup> 横浜薬大, <sup>2</sup> 京都府立医大) ○磯村茂樹<sup>1</sup>, 藤吉竜也<sup>1</sup>, 吉澤祐香里<sup>1</sup>, 鈴木美紀<sup>2</sup>, 鈴木孝禎<sup>2</sup>, 奥野義規<sup>1</sup>, 佐藤康夫<sup>1</sup>

3P-12 大規模バーチャルライブラリー生成から探索までの直感的なワークフロー提案

(<sup>1</sup> Optibrium Ltd., <sup>2</sup> 株ヒューリンクス) Aishling Cooke<sup>1</sup>, ○田島澄恵<sup>2</sup>, James Chisholm<sup>1</sup>, Ed Champness<sup>1</sup>, Peter Hunt<sup>1</sup>, Matthew Segall<sup>1</sup>, Tamsin Mansley<sup>1</sup>

E: 物性・動態・安全性

3P-13 ゼブラフィッシュを用いた新規中枢毒性評価系の有用性検討

(塩野義製薬) ○齋木翔太, 松山恵吾, 森川裕二, 西村享平, 新井透子, 目良国寛

3P-14 ジアステオマー塩分割工程での化学量論比の最適化による疑似多形制御～特異的な結晶構造の解明とその回避～

(塩野義製薬) ○安藤茂, 宮野哲也, 石橋賢一, 佐藤準人

F: ケミカルバイオロジー

3P-15 フェンタニルで汚染されたヘロインに対するワクチンの開発研究

(<sup>1</sup> 東北医薬大薬, <sup>2</sup> The Scripps Research Institute) ○名取良浩<sup>1,2</sup>, Candy S. Hwang<sup>2</sup>, Lauren C. Smith<sup>2</sup>, Beverly Ellis<sup>2</sup>, Bin Zhou<sup>2</sup>, Kim D. Janda<sup>2</sup>

3P-16 ビタミンK結合タンパク質を蛍光標識する新規プローブの合成

(<sup>1</sup> 芝工大院創薬化学, <sup>2</sup> 芝工大院生化学, <sup>3</sup> 神戸薬大衛生) ○伊東優貴<sup>1</sup>, 廣田佳久<sup>2</sup>, 中川公恵<sup>3</sup>, 須原義智<sup>1</sup>

3P-17 ATP 結合領域の機能的特徴を制御し相同性の高いタンパクキナーゼ間で選択性を獲得する阻害剤の創製研究  
(<sup>1</sup>ワシントン大学化学科, <sup>2</sup>小野薬品工業) Sujata Chakraborty <sup>1</sup>, ○犬飼隆之<sup>2</sup>, Martin Golkowski <sup>1</sup>, Linglan Fang <sup>1</sup>, Dustin J. Maly <sup>1</sup>

G : 創薬実践 (ケーススタディー)

3P-18 Tip48/Tip49 阻害剤 (1) : 抗がん剤を志向したオキサジアゾール環を有するアンチピリン誘導体  
(<sup>1</sup>第一三共, <sup>2</sup>第一三共ノバーレ, <sup>3</sup>北里第一三共ワクチン) ○塚田智晴<sup>1</sup>, 海老澤正幸<sup>1</sup>, 杉本雄一<sup>1</sup>, 谷口亨<sup>1</sup>, 平野慎平<sup>1</sup>, 室文人<sup>3</sup>, 鈴木貴<sup>1</sup>, 浜田知明<sup>1</sup>, 村田健史<sup>1</sup>, 武智翔<sup>1</sup>, 元木理絵<sup>1</sup>, 神子島佳子<sup>1</sup>, 平沢真<sup>1</sup>, 萩原克宣<sup>1</sup>, 藤井義峰<sup>2</sup>, 橋本浩一<sup>2</sup>, 村上亮<sup>1</sup>, 高田武彦<sup>1</sup>, 岩永剛一<sup>1</sup>, 萩野谷憲康<sup>1</sup>, 魚戸浩一<sup>1</sup>

3P-19 Tip48/Tip49 阻害剤 (2) : 抗がん剤を志向したジアミドリンカーを有するアンチピリン誘導体  
(<sup>1</sup>第一三共, <sup>2</sup>第一三共ノバーレ) ○浜田知明<sup>1</sup>, 海老澤正幸<sup>1</sup>, 鈴木貴<sup>1</sup>, 村田健史<sup>1</sup>, 塚田智晴<sup>1</sup>, 元木理絵<sup>1</sup>, 神子島佳子<sup>1</sup>, 平沢真<sup>1</sup>, 萩原克宣<sup>1</sup>, 藤井義峰<sup>2</sup>, 村上亮<sup>1</sup>, 高田武彦<sup>1</sup>, 岩永剛一<sup>1</sup>, 萩野谷憲康<sup>1</sup>, 魚戸浩一<sup>1</sup>

3P-20 芳香環を有するクマリン誘導体の合成とアロマターゼ阻害能の測定  
(北医大薬) ○山口由基, 西園直純, 小田和明

3P-21 経口投与可能な新規 MALT1 阻害薬とその乾癬モデルマウスに対する薬効  
(東レ(株)医薬研究所) ○徳丸和之, 森脇光博, 沖村慶一, 安達庸平, 浅場絢ヌネツ, 後藤康文, 藤井茂雄, 浅岡由次, 坂井知津香, 桜田恵里, 青木拓実

3P-22 COPD 治療に有用なメペンゾラード誘導体の探索  
(<sup>1</sup>就実大薬, <sup>2</sup>武蔵野大薬, <sup>3</sup>聖マリアンナ医大, <sup>4</sup>LTT バイオファーマ) ○山川直樹<sup>1</sup>, 田中健一郎<sup>2</sup>, 浅野帝太<sup>3</sup>, 水島徹<sup>4</sup>

3P-23 PDE10A 阻害剤の合成研究  
(アステラス製薬(株)) ○茅野綾香, 本多集悟, 森田真正, 米沢公一, 濱口渉, 天野靖士, 森口博行, 山崎真也子, 青田正樹, 富島昌紀, 増田直之

3P-24 新規 GPR119 作動物質創出に関する合成研究  
(大正製薬(株)) ○川村円, 松田大輔, 小橋陽平, 三上綾子, 川部憲一, 伏木啓子, 濱田まこと, 須賀洋一郎, 塩澤史康, 西本伸一, 木村佳代, 三吉雅子, 高山典子, 大嶽憲一, 柿沼浩行

3P-25 HIV 中和抗体の作用を増強する新規 CD4 ミミック  
(<sup>1</sup>東京医歯大生材研, <sup>2</sup>国立感染研エイズ研セ, <sup>3</sup>京大ウイルス再生研, <sup>4</sup>熊大エイズ学研セ) 高橋耕平<sup>1</sup>, 増田亜美<sup>1</sup>, 原田恵嘉<sup>2</sup>, 小早川拓也<sup>1</sup>, 石田有佑<sup>1</sup>, 苛原優<sup>1</sup>, 三浦智行<sup>3</sup>, 松下修三<sup>4</sup>, 吉村和久<sup>2</sup>, ○玉村啓和<sup>1</sup>



- 3P-26 各種ベンゾチオフェンフラボノイド誘導体の合成とがん細胞増殖抑制効果  
(<sup>1</sup> 金沢大院医薬保, <sup>2</sup> ノースカロライナ大) ○平澤幸香<sup>1</sup>, 谷口由花子<sup>1</sup>, 佐賀野桃子<sup>1</sup>, 齋藤洋平<sup>1</sup>, 後藤益生<sup>2</sup>, 後藤(中川)享子<sup>1,2</sup>
- 3P-27 エレモフィラン型セスキテルペン PC-A の合成とトリプルネガティブ乳がん細胞選択的増殖抑制評価  
(<sup>1</sup> 金沢大院医薬保, <sup>2</sup> ノースカロライナ大) ○佐賀野桃子<sup>1</sup>, 齋藤洋平<sup>1</sup>, 後藤益生<sup>2</sup>, 後藤(中川)享子<sup>1,2</sup>
- 3P-28 マルチターゲット型抗腫瘍活性を示す新規カルボラン誘導体の創製  
(<sup>1</sup> 東北医薬大薬, <sup>2</sup> 昭和大薬) ○皆瀬麻子<sup>1</sup>, 太田公規<sup>2</sup>, 白田智七美<sup>1</sup>, 遠藤泰之<sup>1</sup>
- 3P-29 経口型 Retinoic Acid Receptor-Related Orphan Receptor- $\gamma$ -t (ROR $\gamma$ t) 阻害剤の創製研究  
(塩野義製薬) ○佐々木義一, 大段正英, 山本志保, 木田士郎, 清水雅也, 春名貴予, 上山あずみ, 渡邊郁剛, 奥野隆行
- 3P-30 ジアリアルヘプタノイド誘導体のがん化学療法増感効果  
(<sup>1</sup> 金沢大院医薬保, <sup>2</sup> ノースカロライナ大) ○宮岸佐衣<sup>1</sup>, 齋藤洋平<sup>1</sup>, 後藤益生<sup>2</sup>, 後藤(中川)享子<sup>1,2</sup>
- 3P-31 セフェム系抗菌薬の経口吸収性改善を指向した新規プロドラッグ探索研究  
(塩野義製薬) ○佐野将之, 吉澤秀則, 村井均, 島岡祐行, 村上有紀, 小平尚輝, 吉田弘志, 加藤輝和
- 3P-32 プリン骨格を有する新規 CK2 阻害剤の設計、合成と活性測定  
(<sup>1</sup> 近大薬, <sup>2</sup> 府大院理) ○吉岡賢司<sup>1</sup>, 中川愛理<sup>1</sup>, 谷口誠哉<sup>1</sup>, 露口正人<sup>2</sup>, 木下誉富<sup>2</sup>, 西脇敬二<sup>1</sup>, 中村真也<sup>1</sup>, 仲西功<sup>1</sup>
- ◆ 3P-33 Tankyrase inhibitors : Evidence for therapeutic potential in immuno-oncology  
(<sup>1</sup> Mercachem bv, <sup>2</sup> University of Oulu, <sup>3</sup> Leibniz-Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie (FMP) , <sup>4</sup> Berlin Institute of Health (BIH) , <sup>5</sup> University of Oslo and Oslo University Hospital)  
○ Luc Van Hijfte<sup>1</sup>, Anita Wegert<sup>1</sup>, Jo Waaler<sup>5</sup>, Ruben Leenders<sup>1</sup>, Sven Sowa<sup>2</sup>, Upendra Rao Anumala<sup>3</sup>, Piotr Nieczypor<sup>1</sup>, Sjoerd Aertssen<sup>1</sup>, Eddy Damen<sup>1</sup>, Marc Nazaré<sup>3,4</sup>, Lari Lehtiö<sup>2</sup>, Stefan Krauss<sup>5</sup>
- 3P-34 Design, synthesis and evaluation of epigenetic inhibitors based on o-substituted anilide structure  
(Kyoto Prefectural University of Medicine) ○ Pattaporn Jaikhan, Yukihiro Itoh, Takayoshi Suzuki

## H : 創薬方法論

- 3P-35 微生物を用いた C-H 結合活性化を起点とする化学合成と創薬への応用  
(エーザイ株式会社<sup>1</sup> hhc データクリエーションセンター,  
<sup>2</sup> ニューロロジービジネスグループ, <sup>3</sup> メディシン開発センター) ○大久保真哉<sup>1</sup>,  
澁口朋之<sup>2</sup>, 江奈英里<sup>3</sup>, 奥田彰文<sup>1</sup>

## I : 合成方法論

- 3P-36 23 位修飾 25- ヒドロキシビタミン D<sub>3</sub> の合成と代謝研究  
(<sup>1</sup> 帝京大薬, <sup>2</sup> AMED-CREST, AMED, <sup>3</sup> 富山県大工, <sup>4</sup> 京大化研) ○川越文裕<sup>1,2</sup>, 安田佳織<sup>3</sup>,  
上杉志成<sup>2,4</sup>, 榊利之<sup>3</sup>, 橘高敦史<sup>1,2</sup>
- 3P-37 2 $\alpha$ -(2- テトラゾールエチル) 活性型ビタミン D<sub>3</sub> とその 19- ノル体の合成と代謝  
(<sup>1</sup> 帝京大薬, <sup>2</sup> 富山県大工) ○高野真史<sup>1</sup>, 安田佳織<sup>2</sup>, 真野寛生<sup>2</sup>, 榊利之<sup>2</sup>, 橘高敦史<sup>1</sup>

## K : 低分子構造解析・分析・精製

- 3P-38 AI 支援、HPLC キラルスクリーニングの効率化  
(クロムソードジャパン株式会社) ○小西一豪, Galushko Sergey
- 3P-39 Preparation and Pharmacological Evaluation of Different Extracts of  
Date Palm Fruit (*Phoenix Dactylifera L.*) on TNF Stimulated PSCs  
(<sup>1</sup> Sultan Qaboos University, <sup>2</sup> Deutsches Krebsforschungszentrum (DKFZ))  
○Younis Baqi<sup>1</sup>, Reem A. Al Alawi<sup>1</sup>, Jörg D. Hoheisel<sup>2</sup>,  
Mohamed Saiel Saeed Alhamdani<sup>2</sup>















