

未来化学データサイエンス、毒性予測検出と予測、ロボット合成と創薬

Future chemical data science, Toxicity detection and prediction, Robot synthesis on drug design

開催趣旨：

現在情報系の進歩は様々な分野で急速に進んでいる。創薬分野でも情報が研究に及ぼす内容や分野が拡大しつつある。これらの特徴は従来から展開されてきた技術（データ解析、ロボット工学、データベース等）が現代の要求に答える形で再構成されてきていることである。

本フォーカストセッション（FS-17）では、ビッグデータ時代にあるべき未来型化学データサイエンスシステム、化合物毒性のインシリコによる評価、そして究極の化学である化合物合成の自動化という情報時代の最先端テーマについて、ご講演いただく。

モデレーター： 湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

曾根 秀子 Hideko Sone

横浜薬科大学 Yokohama University of Pharmacy

高橋 孝志 Takashi Takahashi

横浜薬科大学 Yokohama University of Pharmacy

1. 「ビッグデータ時代の未来化学データサイエンスシステム」

湯田 浩太郎 Kohtarō Yuta

株式会社 インシリコデータ In Silico Data, Ltd.

現代は IT およびビッグデータ時代と呼ばれている。このビッグデータを展開し、最高のパフォーマンスを出すには従来型の伝統的な概念を受け継いだシステムでは実現困難である。これらのビッグデータやデータサイエンスおよび AI 等の最新の技術を化学分野に展開するには、化学以外の分野では存在しない留意点や問題点を解決することが求められる。これらの留意点や問題点を解決することで、真の化合物ビッグデータ、化学データサイエンス、そして化学人工知能等の最新の技術の適用が実現する。これらの問題について考察/討論する。

2. 「創薬における早期毒性の検出と予測の重要性」

曾根 秀子 Hideko Sone

横浜薬科大学 Yokohama University of Pharmacy

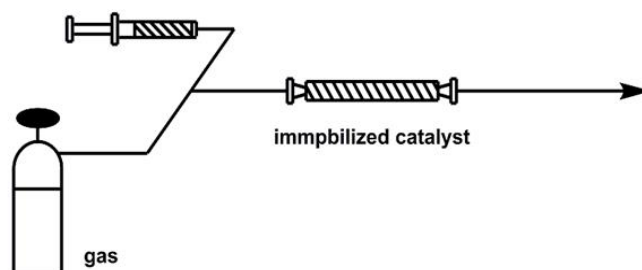
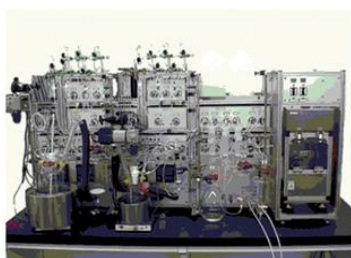
分子標的薬、抗体医薬、核酸医薬などゲノム編集治療や免疫細胞治療などの新たな治療剤によって引き起こされる意図しない副作用の発現が問題となっている。創薬におけるこの見逃せない大きなリスクをどのように回避するのかについて、様々な対策が検討されている。望ましくない分子を迅速に識別するように設計された *in vitro* 毒性アッセイを備えた手法は、以前は多くの組織で採用されたアプローチであった。しかし、このアプローチには無視できない大きな費用がかかる。したがって、有効な全身および組織曝露を考慮せずに、化合物を早期データポイントで正確に分類する複雑さを反映するために、解析手法の重要な改良が最近提案される。本講演では、様々な毒性の予測・検出方法の最新の動向について、新技術が毒性評価にどのように影響するかについての展望も紹介したい。

3. 「Drug Discovery Applying Robot Synthesis & Flow Chemistry and Its Social Effect in Japan」

高橋 孝志 Takashi Takahashi

横浜薬科大学 Yokohama University of Pharmacy

Robot synthesis and flow chemistry have attracted a great deal of attention in recent years because these process improve both the reproducibility and reliability of synthesis.¹ Development of automated synthetic procedures and storage of relevant digital data allow anyone to reproduce the same results anytime and anywhere using the same apparatus and reagents.



As a result, synthetic chemists can spend more time on advanced and challenging problems. Automated synthesis and flow chemistry often enhance the safety profile of the synthetic processes.² Flow chemistry is effective for the hazardous reactions using toxic reagents or high pressure gases. Herein, we report the automated synthesis of taxol³, enediyne⁴, lewisX⁵ and ketopiperazine analogues and the flow synthesis of peptides⁶ and aliphatic aldehydes⁷. We also would like to discuss the social effect in Japan using the lab-automation and digitalize.

References:

- 1) Cork, D. G.; Sugawara, T. *Laboratory Automation in the Chemical Industries*, Marcel Dekker Inc., New York, 2002.
- 2) Mallia, C. J.; Baxendale, I. R. *Org. Process Res. Dev.* 2016, 20, 327–360.
- 3) Doi, T.; Fuse, S.; Miyamoto, S.; Nakai, K.; Sasuga, D.; Takahashi, T. *Chem. Asian J.* 2006, 1, 370–383.
- 4) Tanaka, Y.; Fuse, S.; Tanaka, H.; Doi, T.; Takahashi, T. *Organic Process Research & Development*, 2009, 13, 1111–1121.
- 5) Tanaka, H.; Matoba, N.; Tsukamoto, H.; Takimoto, H.; Yamada, H.; Takahashi, T. *Synlett* 2005, 5, 824.
- 6) Fuse, S.; Mifune, Y.; Takahashi, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, 53, 847–850.
- 7) Takahashi, T.; Machida, K.; Kido, Y.; Nagashima, K.; Ebata, S.; Doi, T. *Chem. Lett.* 1997, 1291–1292.