

### 薬物動態のインビトロとインビボは どこまで近づけるのか

オーガナイザー

樋坂章博(千葉大院薬)  
伊藤清美(武蔵野大薬)  
吉門崇(横浜薬大)

薬物服用後の体内動態の解析は制御する要因の定量的理解が特に進んだ領域で、創薬および医療の両方の現場でコンピュータによる予測が一般的になっている。現在はそのモデリングとシミュレーションと呼ばれる技術が薬理学、毒性学へも拡大するに至っている。そのような解析の実績が強調される一方で、薬物体内動態の解析でも未だ合理的に説明できない事象が実は多

数残っている。説明できない現象は、その矛盾をスケーリングファクタとして定数を乗じて一見解決されたかのように振る舞うことが習慣化しているが、矛盾の理由を説明できないと本当に予測できていることにならない。理解の不十分さに真摯に向き合う必要がある。

本シンポジウムではそのような観点から、薬物吸収や複雑な相互作用、あるいは脳内分布などのモデリングの難しさが顕在化している研究テーマで最新の進歩について紹介いただき、現状を本質的に進歩させるには何が必要かについて論じる。(樋坂章博)

### 第17回若手が拓く新しい薬剤学

—ソフトマテリアルによる新たな製剤開発

オーガナイザー

門田和紀(大阪医薬大薬)  
勝見英正(京都薬大)

近年、低分子医薬に加えて、蛋白質医薬、核酸医薬等の創薬が台頭し医薬品モダリティが多様化している。その際に、従来の製剤設計に加え、新たな視点の“柔らかい粒子”を利用した製剤設計が重要となり、その物理化学的性質や細胞生物学的な相互作用の理解が欠かせない。こうした背景から、大学および企業においてソフトマテリアルを利用した製剤技術開発および評価について、活発で精力的に研究されている若手研究者が集結し、最新の研究

例や開発例について紹介すると共に、今後ますます重要となる計算化学を利用した製剤設計についても議論することが可能な内容を企画した。

具体的には、新たな素材の超分子による動的特性を駆使した変幻自在型製剤素材のDDS製剤開発、蛋白質の固体表面を界面活性剤で被覆し、油中に分散させたsolid-in-oil技術、共非晶質を利用した経皮製剤、計算化学を利用した製剤設計とナノ粒子の細胞膜への透過機構についての講演である。本講演において、ソフトマテリアルによる新たな製剤開発に関する最新データを紹介し、その展望について議論したい。(門田和紀)

### 創薬イノベーションに貢献する 新時代のナノ粒子テクノロジー

オーガナイザー

鈴木亮(帝京大薬)  
小暮健太郎(徳島大薬)

細胞外小胞(EVs)は、蛋白質や核酸などの様々な分子を内包したナノ粒子であり、細胞間のコミュニケーションツールとして機能し、生体の恒常性維持において重要な役割を担っている。一方、疾病時には、正常とは異なるEVsが産生され、異常な情報伝達が生じていると考えられている。そのため、異常なEVsの解析は、疾病の早期発見や疾病の発症メカニズムの解明につながるものと期待されている。

また、このような細胞間での情報伝達を担っているEVsは、生体内でのドラッグデリバリーシステム(DDS)を実践している天然のナノ粒子製剤であると言える。従って、このEVsの機能を人工的に利用することができれば、生体機能に基づく究極のDDS製剤の開発につながるものと考えられる。

そこで本シンポジウムでは、EVsに関連した解析技術やDDS製剤開発を中心に、創薬イノベーションに貢献する新時代のナノ粒子テクノロジーについて議論したい。(鈴木亮)

### 国際交流シンポジウム

### ドイツ薬学会代表者講演会

オーガナイザー

林良雄(東薬大薬)

日本薬学会とドイツ薬学会(DPhG)は2000年に交流協定を締結後、各年會に代表者を交互に招聘してきた。第142年會ではDPhGからお2人をお招きし、国際交流シンポジウムを開催する。講演者はDPhG会長のDagmar Fischer教授(FAU)と年會会長のMichaela Schulz-Siegmund教授(Leipzig大)である。Fischer教授はDDSの専門家である。細菌の形成す

るバイオフィルムを克服して薬物を送達するナノ粒子や逆にバイオフィルムを利用したDDSの研究を行っている。一方、Schulz-Siegmund教授は高分子材料の専門家である。骨異化因子の機能を制御する生分解性マクロマーやsRNA含有架橋ゼラチン微粒子により骨形成能を改善する研究を行っている。お2人ともDPhGの運営のみならず、活発な創薬研究を展開していることから、日独薬学の貴重な情報交換の機会となればありがたい。(林良雄)

### 創薬・医療における人工知能の活用

オーガナイザー

有馬英俊(第一薬大薬)  
関嶋政和(東工大情報)

ディープラーニング技術の目覚ましい発展ならびにビックデータの蓄積により、機械翻訳や異常検知、画像解析などの様々なタスクを行う人工知能(AI)が日常生活で活用されている。その流れは、生命科学領域

においても同様であり、大規模なオミックス情報に加えて、AlphaFold2やRoseTTAFoldによる様々な蛋白質の構造予測やAIによる化合物の生成などの革新的技術の開発、さらにはAIによる医用画像解析やデジタルセラピューティクス保険適用などの事例により、最近、AI創薬や医療AIへの期待が非常に高まっている。

このような背景から、本シンポジウ

ムでは、創薬、創剤および医療へのAIの活用と今後の展開に関して、「AIによるデータ駆動型創薬と分子設計」「Hit-to-Leadを支援する機械学習手法の構築とその応用」「既存概念に基づく効果的な機械学習：薬剤学を事例にして」「創剤と医療におけるAI活用の概要」というタイトルで、4人の先生方にご講演をいただく。本シンポジウムが、AIを利用した創薬・創剤および医療分野での研究・開発等の一助になれば幸いである。

(有馬英俊)

## 祝 日本薬学会 第142年會

(順不同)

 <p>一般財団法人 <b>日本医薬情報センター</b></p> <p>〒150-0002 渋谷区渋谷二丁目11番15号(長井記念館) 電話 〇三(五四六六)一八一 URL: <a href="https://www.japic.or.jp">https://www.japic.or.jp</a></p>	 <p>公益財団法人 <b>日本薬剤師研修センター</b></p> <p>〒105-0003 東京都港区西新橋二丁目三番一 電話 〇三(六四五七)九〇四</p>	 <p>公益社団法人 <b>薬剤師認定制度認証機構</b></p> <p>〒105-0003 東京都港区西新橋一丁目九番二 電話 〇三(三五一九)五八三</p>	 <p>一般社団法人 <b>日本病院薬剤師会</b></p> <p>〒150-0002 東京都渋谷区渋谷二丁目11番15号(長井記念館) 電話 〇三(三四〇六)五〇三 FAX 〇三(三七九七)五〇三</p>	 <p>公益社団法人 <b>日本薬剤師会</b></p> <p>〒160-8389 東京都新宿区四谷三丁目1番1号(四谷安田ビル7F) 電話 〇三(三三五三)一一七〇</p>	<p><b>第一薬科大学</b></p> <p>〒815-8511 福岡市南区玉川町二丁目1番1号 電話 〇九二(五四一)〇一六一</p>	 <p>兵庫医科大学薬学部</p> <p>〒650-8530 神戸市中央区港島一丁目3番16号 電話 〇七八(三〇四)三〇〇六</p>	 <p>神戸薬科大学</p> <p>〒658-8558 神戸市東灘区本山北町四丁目1番1号 電話 〇七八(四五三)〇〇三一</p>
--	---	---	---	--	---	--	--