

大学薬学部・創薬関連部門（任意選択）の研究テーマ別数（2）

大学名	部門・分野・講座等	研究室数	天然物からの活性物質の単離・精製・誘導体の合成	天然物活性物質の生合成・応用・機能解析・評価	天然物・生理活性物質の全合成	反応・合成法の開発（含触媒反応）	分子設計・合成/コンピュータ解析	構造活性相関	疾患を対象とした具体的薬剤の合成研究	その他の合成研究	化合物ライブラリーによるスクリーニング	細胞機能・生体成分機能解析、代謝・動態、相互作用研究等	疾病・病態に関する生化学・創薬ターゲット研究	遺伝学研究・ゲノム創薬関連（微生物を除く）	微生物学的研究	製剤/DDS	その他の研究
京都大学	薬学研究科/薬学科専攻/薬品創製化学	4		4	4	8	1	1	3	1							
	同専攻/薬品機能統御学	2		1								8	1				
	同専攻/薬品製造設計学	2										6	1	4			1
	同専攻/精密有機合成化学	1			1	2											
	同専攻/生体分子薬学	2										8					
	同専攻/生体機能薬学	3										2		7			2
	同専攻/生体情報薬学	2										9	4				
名古屋市立大学	薬学部/創薬生命科学専攻/医薬化学講座	4		1	1	4	4	1	1			3	1				
	同専攻/生命分子薬学講座	6										3	7	4		5	5
慶應義塾大学	薬学研究科	22 ²⁾	1	1		1	1		2			6	4	4		2	5
東京理科大学	薬学部/創薬科学系	13	3	2	2	3		2	2				2			5	4
北里大学	薬学部/大学院薬学研究科	18 ³⁾		6	2	2	5	1	10			8	7		4		3
	北里生命科学研究所/創薬化学部門	5		10	1				3						6		

出所) 大学のホームページ等公表資料より作成

大学薬学部・創薬関連部門（任意選択）の研究テーマ別数（3）

大学名	部門・分野・講座等	研究室数	天然物からの活性物質の単離・精製・誘導体の合成	天然物活性物質の生合成・応用・機能解析・評価	天然物・生理活性物質の全合成	反応・合成法の開発（含触媒反応）	分子設計・合成/コンピュータ解析	構造活性相関	疾患を対象とした具体的薬剤の合成研究	その他の合成研究	化合物ライブラリーによるスクリーニング	細胞機能・生体成分機能解析、代謝・動態、相互作用研究等	疾病・病態に関する生化学・創薬ターゲット研究	遺伝学研究・ゲノム創薬関連（微生物を除く）	微生物学的研究	製剤/DDS	その他の研究
東京薬科大学	薬学部創薬化学系	13	4	2	3			1	2			6				4	1
立命館大学	薬学部	22 ⁴⁾	5		1	1	1					9	1	1			1
合計		182	32	32	26	56	27	8	34	6	1	106	51	20	21	20	38

1) 21分野(連携講座を含む)のうち創薬関連10分野(薬物動態、薬剤学、薬理学、薬効安全性、分子ス生物学、機能分子解析学、生物有機合成化学、薬物分子設計学、機能分子合成化学、薬物送達システム学)を選択。

2) 22講座のうち、創薬関連7講座(有機化学、天然医薬資源学、医薬品化学、生化学、分子機能生理学、創薬物理学、分析科学、病態生理学)を選択。

3) 18教室のうち、創薬関連12講座(生体分子解析学、生薬、生化学、分子薬理学、微生物学、薬剤学、生命薬化学、薬品製造学、生物3分子設計学、微生物、薬品製造、創薬物理化学、医薬品化学)を選択。

4) 22研究室のうち、創薬関連8研究室(分子生理学、生薬学、ゲノム機能学、微生物化学、精密合成化学、生体情報制御学、分子薬物動態学、情報薬理学)を選択。

出所) 大学のホームページ等公表資料より作成

各大学における創薬基盤・手法とその開発状況を表に示すが、以下のことがいえる。

- ① 東京大学の創薬オープンイノベーションセンターに代表されるように、薬学部や医学部がある主要大学における創薬研究は盛んになりつつある
- ② ライブラリー構築や HTS のようなスクリーニング機能構築は、まだ不十分であるが、文部科学省等の関連プロジェクトにより、主要大学を中心に整備が進みつつある
- ③ 北里大学、琉球大学、長崎大学のように微生物を中心とした天然物ライブラリーを構築する大学が多いのは1つの特徴であり、天然物由来の創薬が比較的盛んな1つの理由になっていると考えられる
- ④ 企業との関係は、産学連携による共同研究の他、製薬企業等出身の教官の増加、企業スポンサーによる冠講座の増加等、多様な形で増加しているとみられる
- ⑤ 創薬化学関連の研究室は多くても、直接医薬品につながるような成果を挙げている大学は、それほど多くないとみられる
- ⑥ また、非臨床試験以降については、大学自身が直接係ることは少ない。ただし、東北大学、大阪大学、九州大学等での取り組みがみられる

各大学における創薬基盤・手法とその開発状況（1）

大学名	担当部門	実施課題/目的	協働機関	ゲノム解析	ライブラリー		スクリーニング		最適化/活性相関
					化合物	天然物	技術開発	スクリーニング	
北海道大学		未来創薬・医療イノベーション拠点形成(平成18年7月～平成28年3月)	塩野義製薬、日立製作所、住友ベークライト、日本メジフィックス、三菱重工業		コンビナトリアル合成法と酵素合成法を用いた糖ペプチドライブラリーの構築		創薬標的分子等のアレイ化にハイスループットアッセイ系の確立(住友ベークライトと共同)		
東北大学	創成応用医学コアセンター/創薬・探索臨床研究コアセンター	医学・生物学・構造生物学・薬学・化学・コンピューター工学の異分野融合・学際研究			大規模化合物ライブラリーの構築(化合物ライブラリー・プラットフォーム)			・in silico スクリーニング 構造生物学分子設計 ・ハイスループット・スクリーニング	メディシナルケミストリーPF 構造最適化PF
大阪大学	蛋白質研究所								
	産業科学研究所				コンビナトリアルケミストリーにおける新手法の開発				
	アカデミック医薬探索センター構想(2011.10.26 発表)	目的/大学の研究者による基礎研究の成果を基にした、医薬開発研究の初期段階を担う組織で、学外に株式会社設置の方向。					アッセイ系の構築	リード化合物の原型の選出	
九州大学	創薬育薬最先端研究基盤センター						難治性疾患に係るスクリーニング法の開発	左記の方法による医薬品探索	難治性疾患に係る創薬シーズの化学合成による修飾と適正化

出所) 公表資料より作成

各大学における創薬基盤・手法とその開発（2）

大学名	担当部門	疾患モデル/ 発症メカニズム	非臨床試験	蛋白質科学		ドラッグデザイン	実験 施設	その他
				調製	蛋白質構造解析			
北海道 大学				バイオ医薬候補物 質の大量調製 (活性評価:塩野義 製薬)	NMR、X線解析など による蛋白質構造 高速解析技術開発 FBDD法のための 全自動システムを 構築	(NMR、X線解析な どによる蛋白質構 造解析に基づく) FBDD法のための 全自動システムの 構築		複合糖質糖鎖に焦点を あてた糖鎖解析、糖鎖に焦点をあてた プロテオミクス、リポミク ス解析 →幹細胞等状態評価、 同定、マーカー探索
東北大学	創成応用医学コアセ ンター/創薬・探索臨 床研究コアセンター		薬物動態 ・薬物生体応答 ・インシリコ ・薬物動態評価 分子イメージング ・ポジトロン標識 ラット、サルでの非臨 床試験					・早期探索臨床プロジェク ト ・レギュラトリーサイエン スプロジェクト
大阪大学	蛋白質研究所			蛋白質化学/蛋白 質構造生物学/蛋 白質高次機能学/ 蛋白質国際統合/ プロテオミクス総合 センター等				
	産業科学研究所							
	アカデミック医薬探索 センター構想		薬理活性、安全 性、安定性評価					ドラッグデリバリー研究の 初期段階
九州大学	創薬育薬最先端研究 基盤センター	・基本的難治 性疾患モデル の開発 ・難治性疾患 発症メカニ ズムの解明	・難治性疾患に係 る薬物動態解析、 時間薬理及び医 薬品送達技術等 の有効性・安全性 の確保に係る研究					

各大学における創薬基盤・手法とその開発（3）

大学名	担当部門	実施課題 /目的	協働機関	ゲノム解析	ライブラリー		スクリーニング	
					化合物	天然物	技術開発	スクリーニング
東京大学	創薬オープンイノベーションセンター	創薬等支援技術 基盤プラットフォーム (ターゲットタンパク研究プログラム) /制御拠点 東大担当; 化合物 ライブラリーの基 盤構築			General Library ・タンパク質親和性候補 化合物を広く選択、化合 物のクラスタリングによる 代表化合物の収集	Natural Product Library 新規の骨格構造をもつ 化合物を創製 ・天然型非天然化合物 の創製 ・自動制御型化合物精 製支援装置の開発	化合物アレイによる スクリーニング技術 ・独自の化合物アレイ の作成技術開発	in silico スクリー ニング (Focused Library 作成過 程で実施)
					Fragment Library ・分子量 250 以下のフラ グメント化合物の収集・合 成		新規プローブによる スクリーニング技術 ・独自の原理に基づく 蛍光化合物の創製	
					Validated Compound Library ・既知薬理活性物質		蛍光相関分光による スクリーニング技術 ・FCS などに基づくリ ガンドとタンパク質の 相互作用の高速検出 システムの確立(定 量性・再現性)	
				Validated Compound Library ・キナーゼ、GPCR、その 他本事業の解析ターゲッ トタンパク質に焦点を絞っ て予測・収集・合成		in silico スクリーニ ング技術		
		化合物ライブラリーを利用した創薬 等最先端研究・教育 基盤の整備	北大、東北 大、京都大、 大阪大、九州 大					

各大学における創薬基盤・手法とその開発（４）

大学名	担当部門	実施課題/目的	協働機関	ゲノム解析	ライブラリー		スクリーニング	
					化合物	天然物	技術開発	スクリーニング
京都大学	ファーマコゲノミクス・ケモゲノミクス創薬コアラボ	目的/東京大学・創薬オープンイノベーションセンターに構築された公的化合物ライブラリーを活用した創薬研究の連携拠点として、関西圏の産官学横断型の創薬研究の支援			ファーマコゲノミクス・ケモゲノミクス創薬コアラボ(3万種超)			左記化合物ライブラリーからのシーズ探索
	大学院薬学研究科/革新的ナノバイオ創薬研究拠点	バイオテクノロジーとナノテクノロジーの融合	立命館大学		・マイクロ体内ロボット開発 ・ナノマシン等生体高分子のナノオペレーション技術開発			
	大学院薬学研究科/最先端創薬研究センター	最先端研究開発支援プログラム:次世代質量分析システム開発と創薬・診断への貢献	島津製作所		島津製作所・田中フェローが中心となり、世界最高性能の質量分析システム(従来に較べて感度 10,000 倍)を開発し、京都大学において当該システムを用いて、産学連携、医薬工連携により、がん(乳がん、食道がん)、アルツハイマー病の新たな診断法、医薬の開発に資するバイオマーカーを見出す。			
	アステラス創薬プロジェクト		アステラス製薬		・京都大学の要素技術:基礎免疫・病態研究、ゲノム疫学、構造生物学、ケミカルバイオロジー、遺伝子改変疾患モデル動物、システムバイオロジー、探索臨床研究 ・アステラス製薬の要素技術:データベースに基づく探索、化合物・天然物ライブラリー、ハイスループットスクリーニング、コンビナトリアルケミストリー、SBDD、大規模臨床試験 → 革新的免疫制御剤			
			武田薬品工業					

各大学における創薬基盤・手法とその開発（5）

大学名	担当部門	実施課題/目的	協働機関	ゲノム解析	ライブラリー		スクリーニング	
					化合物	天然物	技術開発	スクリーニング
慶應義塾大学	薬学部大学院 薬学研究科/ 分子標的創薬 研究開発センタ ー							
東京理科大学	ゲノム創薬研究 センター	ゲノム科学を基 に、リード化合 物の創製と前臨 床試験までを研 究目標としたア ポトーシス制御 性医薬品の開 発	ゲノム創薬コンソー シアム ・理化学研究所 ・東大医 ・名大医 ・企業	新規創薬タ ーゲット遺 伝子のゲノ ム情報をも とにした網 羅的解析と 同定	<ul style="list-style-type: none"> ・構造ゲノム科学部門 遺伝子発現プロファイル解析システムの開発、及びモデル動物(マウス、ショウジョウバエ)を 活用した比較ゲノム学的手法 ・細胞シグナル制御部門 細胞の増殖、分化、アポトーシスにおけるシグナル伝達機構の解析、および新規の制 御分子の同定と機能解析。特に、生体防御調節因子、アポトーシス制御因子に焦点を絞 った免疫疾患・がん治療薬開発の基盤作り ・分子設計創薬部門 標的受容体の探索、結合部位の解析、決定のデータを基にした新規化合物の分子設 計と合成、がん、エイズ、アルツハイマー病などのアポトーシス疾患治療薬の創製 ・遺伝子・細胞治療部門 アポトーシス制御に関与する創薬ターゲット遺伝子、およびタンパク質の同定。タンパ ク質の立体構造をもとにコンピュータを用いてのドラッグデザイン。新規化合物の薬効評 価 			
北里大学	釜石研究所					海洋微生物ライブラリー (5万株超)		
	生命科学 研究所					微生物ライブラリー		
徳島文理 大学	薬学部					海洋微生物ライブラリー		
琉球大学	熱帯生物圏研 究センター					沖縄微生物ライブラリー		
長崎大学他						海洋微生物ライブラリー		

2) 創薬人材の養成プログラム

文部科学省により人材養成で、以下のような大学における創薬人材養成プログラムがある。

これらは一部の大学を除いて、大学のみで実施されており、創薬の主体である企業との連携があまりなされていないことに課題があると考えられる。

文部科学省による創薬人材の養成プログラム

大学名	部門名・プログラム名	人材養成内容
東京大学	成 20 年度グローバル COE/ 「疾患のケミカルバイオロジ ー教育研究拠点—メディカ ルサイエンスの未来を創造 する医薬融合」	・大学における、産業界も含めた社会のあらゆる分野で 国際的に活躍できる若手研究者を育成する 機能を抜本的に強化し、国際的に卓越した教育・研究 拠点の形成を図る。
慶應義塾 大学	平成 20 年度・大学院教育改 革支援プログラム/ 「創薬に向けた医薬化学を 先導する人材の養成」	・広い視野と科学的思考を備えた人材の養成 ・強い情熱をもち自立的に活動できる人材養成 ・教育研究環境改善学生支援
名古屋市立 大学大学院薬 学研究科/ 名古屋工業大 学大学院工学 研究科	平成 20 年度・大学院教育改 革支援プログラム/ 「薬工融合型ナノメディシ ン創薬研究者の育成」	・ナノバイオテクノロジーや薬物動態・ターゲッティング、イ メージング等、ナノメディシン創薬に関する専門的知識・ 技能の修得を目的とする新規共通履修科目の創設 ・両大学の包括的連携により既に一部開講が始まっている 相互履修可能な共通科目の追加提供 ・当該技術に関する基礎的な技術・知識の獲得と実践的 な技術開発能力の養成を目的とした互いの大学の研究 室へのインターンシップの実施 ・自立的な研究能力の養成を目的とする大学院生による提 案型融合領域共同プロジェクトの推進 ・大学院生が企画・運営する研究成果発表会を中核とし た相互啓発型プログラム
岡山大学	平成 20 年度特別経費プロ ジェクト/「難治性感染症を 標的とした創薬教育推進事 業	・国際シンポジウム開催 ・中国、韓国、インドネシアの大学、研究所と大学間部局 間協定を締結し、国際共同研究の推進基盤を構築 ・国内 8 大学及び 2 研究機関と文科省「感染症研究国際 プログラム」に参画など
岐阜大学・岐 阜薬科大学の 連合大学院	平成 20 年度戦略的大学連 携支援プログラム/「国際的 視点に立つ創薬研究者養 成のための実践的な教育シ ステム」	・創薬関係の最新鋭機器の機能の把握と、その使用によ る研究展望の構築 ・欧米のバイオベンチャーや創薬関連研究所などへの海 外派遣実習の実施し、学生の創薬 研究に対する意欲・目的意識の向上及び国際的視点 の涵養を図る。 ・学際複合領域での研究推進ため、英語によるコミュニケ ーション力を広範な研究領域で発揮するための訓練

長崎大学	薬学部/創薬教育センター	<ul style="list-style-type: none"> ・製薬企業人等の外部講師の招聘 ・外国人創薬研究者等の外部講師の招聘 ・本学部卒業生の招聘による就職支援 ・高校等での啓発・人材勧誘活動(人材発掘) ・国際交流活動の支援
岐阜薬科大学	「創薬学士力養成プログラム」	<ul style="list-style-type: none"> ・「さがす」「つくる」「とどける」の創薬三要素を統合的に理解・実践できる人材の育成
つくば大学	大学と企業とで育てる創薬化学高度人材	<ul style="list-style-type: none"> ・平成 17～21 年度実施実施 ・産学連携による実践型人材育成事業－長期インターンシップ・プログラムの開発－ ・創薬化学企業と協同してプログラム開発

出所) 文部科学省資料等より作成

3) ヒアリングによる各大学の創薬化学への取り組みの現状と課題

創薬化学については人材がいても、製薬企業に対して劣るとの見方が多い。そのため製薬企業 OB を活用している事例や、今後そのような方向性が必要と見方が多い。

また、創薬化学を生かして創薬パイプラインを構築するにはかなりの資金が必要であり、全国に分散した組織が存在するよりも、集約化した拠点が必要との意見も示されている。

なお、大学には創薬化学人材が少ないが、バイオ医薬では創薬化学の必要性が低く、そのような分野を重視すべきとの意見もあった。

アカデミア発の創薬の課題として、以下の点が指摘されている。

- ・ 組織内の連携の必要性 (医学部と薬学部の連携等)
- ・ ポスドク等専門人材の雇用の場の創出
- ・ 創薬、それを生かした事業化が得意な人材の不足
- ・ 創薬ベンチャーにおける米国型モデルの導入が難しいこと (大学、ベンチャーを生かすオープンイノベーションが未確立)
- ・ 知的財産への対応 (シーズの見極め、企業が利用しやすい特許の取得、企業への技術移転)
- ・ ステークホルダーの多さと利害調整の必要性
- ・ スクリーニング以降の創薬化学等への取り組み
- ・ 資金の不足 (研究費が細切れに配分されている、産業革新機構の予算等が使えるとよい)

(2) 創薬化学研究全般の動向

以下の表にメディシナルケミストリーシンポジウム（2010年）・一般講演内容の分類を示す。これらの講演内容を第一発表者の所属機関別にみると、以下の内容が指摘できる。

第29回メディシナルケミストリーシンポジウム（2010年）・一般講演内容

	研究機関	総数*	実際の 創製研究		活性相関 研究	その他の 研究
第一発表者 所属機関	大学	102	43	42%	11	48
	公的機関	6	2	33%	2	2
	企業	31	24	78%	2	5
合計		139	69	49%	15	55

*海外機関の発表を除く

出所) 第29回メディシナルケミストリーシンポジウム（2010年）より作成

1) 大学と公的機関

図表から、以下のことがいえる。

- ① 実学を目指す北里大学の発表が多い。
- ② 2位の東大分生研（分子細胞生物学研究所）には「生体有機化学分野があり、創薬化学を行っている。生物活性物質創製法ならびに質の高い化合物ライブラリー創製法として、標的タンパク質の形状ならびに動的状態に焦点を当てた、マルチテンプレート法ならびにドラマタイプ法を提案し、積極的な創薬研究を行っている。
- ③ 43件の研究中25件が共同研究を行っている。しかし企業との共同研究は少なく、6件（6社）のみにすぎない。相手企業は中堅企業、ベンチャーが多い。
- ④ 私大薬科大学・薬学部からの発表は11校であるが、主要大学に偏っている。
- ⑤ 創製において使用されている手法は、講演要旨集に記載されている内容からの判断ではあるが、ほとんどの研究は通常の合成手法を用いている。

2010年第29回メディシナルシンポジウムにおける具体的な創薬化学研究の発表 (第一発表者の所属：大学)

第一発表者 (海外機関除く)	開発薬剤	共同研究者	要旨集に記載 のある 使用した手法	件数
北里大薬	ピリピロペンA誘導体			7
	オピオイドσ受容体作動薬			
	抗マラリア薬 (BNTX 誘導体)	慶応大医		

	12 員環マクロライド			
	喘息治療薬	北里生命科学研	in silico drug design	
	アルツハイマー病治療薬 (-)-homogalanthamine 誘導体)	星薬大薬		
北里大生命研	抗 MRSA、抗 VRE 薬 (BottromycinA2 誘導体)	北里大院感染防御		
東大分生研	神経芽細胞腫治療剤 (CRABP 分解誘導剤)	国立衛研		4
	メラニン産生抑制剤			
	アンドロゲン受容体分解誘導剤	国立衛研	プロテインノックダウン法	
	ビタミン D 受容体-コアクチベーター 相互作用阻害剤	理研 岡山大院医歯薬	X 線結晶解析	
岡山大院医歯薬	経口血糖降下剤	理研 CMIS 日本大医 県立広島大 京都薬大		3
	Notch-sparring γ セクレターゼ阻 害剤 (アルツハイマー病治療薬)	東大院薬		
	COX-1 阻害剤	県立広島大		
東京薬大薬	抗がん剤 (微小管重合阻害剤 Plinabulin の プロドラッグ)			3
	ネガマイシン誘導体 N3	東大院・総合文化 京都薬大		
東京薬大院薬	新世代抗菌剤 (ミキソピロリン類縁体)		X 線構造解析	
学習院大理	選択的トポイソメラーゼ阻害剤	(財)癌研・癌化学 療法センター		2
	20S プロテアソーム活性化剤			
名市大院薬	抗がん剤 (LSD1 選択的阻害剤)	科学技術振興機構 さきがけ 長浜バイオ大		2
	活性酸素消去剤			
京大院薬	Eg5 阻害剤	静岡県大院薬		2
	アルキル化剤			
岡山大院薬	PPAR γ 選択的アゴニスト	東大分生研 阪大蛋白研 北里大薬		2
	PPAR α 選択的アゴニスト			
東北薬大	カルボラン利用の人口クロライド イオンチャンネル	徳島文理大香川薬		1
東北大院薬	自然免疫抑制剤			1

千葉大院薬	Colechicine 系抗腫瘍薬	ヤクルト中央研		1
千葉科学大薬	神経変性疾患治療剤 (ナフタレン誘導体)			1
慶応大薬	HIV増殖抑制 (プロリン型フラールン誘導体)	熊大薬 熊大院生命科学		1
帝京大薬	ACAT 阻害剤	京都薬品		1
	ビタミン D 誘導体	帝人ファーマ	X 線共結晶解析	1
東京医歯大・生 材研	抗 HIV ペプチド	国立感染研・エイズ 研センター シンガポール大		1
昭和薬大	抗 HIV 剤	鹿児島大医		1
東邦大院薬	アミロイドβ凝集阻害剤 (アルツハイマー病治療薬)			1
富山大病院薬	PPARγ活性化作用物質 (糖尿病性合併症治療薬)	富山大院工 富山大院薬 (株)セラバリュース 岐阜薬大 北里大薬		1
奈良先端大	自己免疫疾患治療薬 (JAK3 阻害剤)	参天製薬		1
京都薬大	GACE1阻害剤 (アルツハイマー病治療剤)		in-silico conformational structure-based design	1
阪大院薬	中性スフィンゴミエリナーゼ阻害 剤			1
関西大化学生 命工	抗がん剤(ヒストン脱アセチル化 酵素阻害剤)			1
神戸薬大	抗肥満剤			1
徳島大院薬	機能性 MRI 造影剤			1
九州大院	骨転移がん治療薬	テムリック(株)		1

2010 年第 29 回メディシナルシンポジウムにおける具体的な創薬化学研究の発表
(第一発表者の所属：公的機関)

第一発表者	創製薬剤	共同発表者	備考	件数
国衛研	抗酸化活性剤 (アルツハイマー病治療薬)	放医研 名市大院薬		3
	抗酸化剤	放医研 芝工大院工 慶大薬 名市大院薬		
	ノンセコ VDR リガンド	帝人ファーマ	X 線共結晶解析	

出所) 第 29 回メディシナルケミストリーシンポジウム (2010 年) 資料より作成

2) 企業

以下のことがいえる。

- ① 製薬企業の具体的な創薬研究との発表には、国内大学、他企業、ベンチャー企業との共同研究が一つもない。製薬企業は、国内においては完全独立型の創薬研究が主体と思われる。
- ② 創薬のターゲットは、最近特に注目されているオーファン医薬の開発を目指したものは少ない。
- ③ 要旨集には、使用した創薬手法の全てが記載されているとは思われないので、実際は多彩な方法を駆使しているものと考えられる。

2010年第29回メディシナルシンポジウムにおける具体的な創薬化学研究の発表
(第一発表者の所属：企業)

第一発表者	創製薬剤	共同発表者	備考	件数
武田薬品工業	DDP-4 阻害剤			8
	前立腺がん治療薬 (17,20 リアーゼ阻害剤)		<i>de novo</i> design	
	カリウムイオン競合型アシッドブロッカー (I) (胃酸分泌抑制剤)		High Throughput Screening	
	カリウムイオン競合型アシッドブロッカー (II)			
	糖尿病治療薬 (GPR40 作動薬)		Homology Model/Docking study	
	性ホルモン依存性疾患治療薬 (GPR54 拮抗剤)			
	血管新生阻害剤 (VEGFR2 キナーゼ阻害剤)			
	血管新生阻害剤 (VEGFR2 キナーゼ阻害剤)		X 線共結晶解析	
中外製薬	Hsp90 阻害剤		Structure-based Drug Design	4
	Hsp90 阻害剤		Virtual Screening & Fragment Screening	

	2 型糖尿病治療薬 (SLGLT2 阻害剤)	中外医科学研究所 C&C Research Laboratories(中外 と韓国企業との合 弁会社)	Pharmacophore Model	
	2 型糖尿病治療薬 (SLGLT2 阻害剤)			
東レ・医薬研 究所	p38MAPK 阻害剤		X 線結晶解析	3
	CK2 選択的阻害剤		in silico screening/Docking Simulation	
	ジャーガス病治療薬	カルフォルニア大	Substrate activity screening	
田辺三菱	PAI-1 阻害剤 (抗血栓剤)			3
	2 型糖尿病治療薬 (SLGLT2 阻害剤)			
	慢性気管支喘息治療薬 (CC ケモカイン受容体 4 拮抗薬)			
塩野義	PPAR σ アゴニスト		SAR	2
	抗肥満薬 (NPY Y5 受容体拮抗剤)		High Throughput Screening /Pharmacophore Model	
第一三共	IKK β 阻害剤		IKK β homology model	1
大日本住友	DDP-4 阻害剤開発			1
大正製薬	ACC1/2 非選択的阻害剤開発			1
明治製菓・医 薬研究所	不安障害治療薬			1

出所) 第 29 回メディシナルケミストリーシンポジウム (2010 年) 資料より作成

(3) 製薬企業の現状と動向

1) 製薬企業（抜粋）が活用している創薬基盤・手法

図表に、公表資料より得られる日本の製薬企業が活用している創薬基盤・手法を示すが、以下のことが指摘できる。

- ① 大学があまり保有していない化合物ライブラリーや HTS、コンビケムの設備や機能を製薬企業は保有している場合が多い。
- ② ケモインフォマティクスやドラッグデザインの機能も保有している企業が多いが、人材面も含め実際に創薬にどの程度生かされているかは不明な部分がある。

製薬企業（抜粋）が活用している創薬基盤・手法（1）

企業名	遺伝子 関連	化合物		スクリーニング			ケモ インフォマ ティックス	コンピ ケム	X線 構造 解析	ドラッグデザイン/ 活性相関	その他
		ライブラ リー	その他	HTS	細胞 スクリーニ ング	その他					
武田薬 品工業	遺伝子 データベ ース	大規模 ライブラ リー		○			○	○	○	Structure Based Drug Design	
アステラ ス製薬	遺伝子 データベ ース	数百万 規模		○			○	○	○	Structure Based Drug Design Fragment Based Drug Design	
第一 三共		○		○				○	○	Structure Based Drug Design	天然物サンプル LC/MS プロファイ ルデータベース
エーザ イ		・数十万 規模 ・多様性 志向型 合成化 合物 ライブラ リー		○	細胞系ス ク リーニン グ・ プラット			○	○	Computer Aided Drug Design Structure Based Drug Design	
塩野義 製薬		数十万 規模	JChem Cartridge (化学構造 関連情報 管理ソフ ト)	○				○	○	Quantitative Structure- Activity Relationship (QSAR) 解析	大阪大学との PET 分子イメージ ング共同研究体 制

出所) 公表資料より作成 (記載していなくても設備や機能を保有している可能性がある)

製薬企業（抜粋）が活用している創薬基盤・手法（2）

企業名	遺伝子 関連	化合物		スクリーニング			ケモ インフォマ ティクス	コンピ ューム	X線 構造 解析	ドラッグデザイン/ 活性相関	その他
		ライブラリー	その他	HTS	細胞 スクリーニ ング	その他					
田辺三 菱		○		○		Structure- based virtual screening			○	Structure Based Drug Design	
大日本 住友 製薬		○		○				○	○	Computer Aided Molecular Design Fragment Based Drug Discovery	
大正 製薬	・ゲノム 解析/配 列予測 ・cDNAラ イブラリ ー	○		○				○	○	Structure Based Drug Design	
キッセ イ薬品		○		○				○	X線解析 装置(2 台)	・QSAR/3D-QSAR 解析 ・フラグメント分子軌道 (FMO)法	天然物サンプルデー タベース

出所) 公表資料より作成 (記載していなくても設備や機能を保有している可能性がある)

2) 創薬技術に係る共同研究

製薬企業の創薬化学等に係る技術導入、共同研究等の例、また大日本住友製薬の大学との共同創薬研究を表として示すが、これから以下のことがいえる。

- ① 大手製薬企業は、創薬化学等の技術を導入したり、共同開発するケースが多いが、その相手は海外の創薬ベンチャー等であるケースが多い
- ② 技術の対象は、抗体等バイオ医薬系の場合が多く、低分子医薬は比較的少ない。低分子医薬は自社に合成等の創薬基盤があり、外部から技術導入したり、外部と共同開発する意義が少ないためと考えられる
- ③ 疾患領域は癌、中枢神経系が多いが、これはアンメット・メディカルニーズが大きく、市場成長性も考えやすい領域であるとみられる

製薬企業の創薬化学に係る技術導入、共同研究等の例（1）

企業名	ニュースリリース日	形態	相手企業	ライセンス・共同研究・投資先の技術	技術の活用対象領域	ライセンス費用
武田薬品工業	2008/5/27	共同研究	米国 Alnylam 社	RNAi 医薬に係るプラットフォーム技術	癌領域 代謝性疾患	契約一時金: 100 百万米ドル 技術移転料: 総額 50 百万米ドル 対象疾患領域の追加: 50 百万米ドル/一領域 マイルストーン: ターゲット毎に 171 百万ドル上限 ロイヤルティ: 販売額に応じて
	2009/2/10	共同研究	米国 XOMA 社	抗体医薬の ・研究開発技術 ・統合情報システム ・データ管理システム		提携拡大に伴う費用: 29 百万ドル マイルストーン: 抗体の研究開発の進捗に応じて ロイヤルティ: 販売額に応じて
	2010/10/8	共同研究	米国 Envoy Therapeutics 社	bacTRAP® 技術 多種多様な細胞型が混在する中枢神経系の中で、疾患関連の特定細胞型で起きている遺伝子発現を、細胞を分離することなく可視化し、精緻に解析できる技術	統合失調症	契約一時金: 3 百万米ドル 研究費負担: 年間 2.25 百万米ドル マイルストーン: 研究開発の進捗に応じて ロイヤルティ: 販売額に応じて
	2010/11/11	共同研究	米国非営利団体 Sage Bionetworks	コンピューター上でバーチャルに構築した最先端の疾患予測モデル	中枢神経疾患/ 遺伝子やバイオマーカーの同定	研究費を負担: 合計 3.6 百万米ドル超
	2010/12/2	ライセンス	米国 Baxter International	ヴェロ細胞培養インフルエンザワクチンに関する培養・製造技術	インフルエンザ	
	2011/4/11	共同研究	英国 Heptares 社	StaR® (Stabilised Receptor) 技 (GPCR の分子構造を安定化技術)	中枢神経疾患 に関わる GPCR	契約一時金: 1.7 百万ポンド 出資: 2.8 百万ポンド (武田 VI) マイルストーン: 最大 60.5 百万ポンド ロイヤルティ: 販売額に応じて
	2011/4/13	共同研究	韓国 Samyang 社	バイオポリマー技術	RNAi 医薬	契約一時金 研究費負担 マイルストーン: 開発の進捗に応じて ロイヤルティ: 販売額に応じて
	2011/5/9	投資	米国 Fate Therapeutics 社	幹細胞調整薬 FT1050 最先端の生物学と再プログラミング技術	再生医療	出資: 武田ベンチャー・インベストメント