

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成 果 報 告 書

平成26年8月20日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団  
会 長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 農学研究科

職 名・学 年 修士課程2年

氏 名 横 井 大 洋

助成の種類	平成26年度・若手研究者在外研究支援・国際研究集会発表助成		
研究集会名	IUPAC農薬化学国際会議		
発表題目	Structure-activity relationship of imidazothiadiazole-type ecdysone agonists for binding to sf-9 cells		
開催場所	アメリカ合衆国・カリフォルニア州・サンフランシスコ・Marriott Marquis		
渡航期間	平成26年 8月 7日 ～ 平成26年 8月18日		
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有( )		
会計報告	交付を受けた助成金額	200,000円	
	使用した助成金額	200,000円	
	返納すべき助成金額	0円	
	助成金の使途内訳	学会参加費	25,135円
		往復航空券	143,950円
宿泊費・交通費の一部		30,915円	
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。) この度は採用いただき誠にありがとうございました。 貴財団からの助成なしには学会参加は困難であったため、深く感謝しております。 今後ともこのような事業を継続していただき、多くの研究者が国際的に活躍できる機会を得られればと願っております。		

## 成果の概要

農学研究科・修士課程 2 年

横井 大洋

報告者は、貴財団の助成を受けて、平成 26 年 8 月 10 日から 14 日にかけてアメリカ合衆国カリフォルニア州サンフランシスコにて開催された第 13 回 IUPAC 農薬化学国際会議 (13<sup>th</sup> IUPAC International Congress of Pesticide Chemistry: 以下 ICPC) に参加し、ポスター発表を行った。

ICPC は、国際純正応用化学連合 (IUPAC) が主催となって 4 年に 1 度行われている国際会議で、今回はアメリカ化学会 (American Chemical Society: ACS) の農薬部門との共催という形で行われた。今回の ICPC は第 248 回 ACS 全国大会と合同開催されており、両会議を合わせて 12,000 人を超える研究者が参加した。そのうち ICPC には 1000 人以上の農薬研究に携わる研究者が参加し、およそ 1000 件の口頭発表およびポスター発表が行われた。10 日にはスペシャルシンポジウムとオープニングセレモニーが行われ、報告者は 2012 年に逝去された松村文夫博士を追悼するシンポジウムに参加した。このシンポジウムでは松村博士にかつて指導を受けた研究者が演者となり、殺虫剤の作用機作や殺虫剤抵抗性に関する研究発表が行われた。11 日～14 日にかけて行われた一般公演は 9 つのセッションに分かれており、農薬の作用機作や環境中での分解・代謝、生態系へのリスク評価など発表内容は多岐に渡っていた。その中でも報告者は主に「発見と合成 (Discovery and Synthesis)」のセッションに参加し、新規農薬の分子設計や有機合成、および構造活性相関に関する講演を聞くことができた。このセッションでは報告者の研究している殺虫剤のみならず除草剤や殺菌剤に関する発表も多数行われていたが、防除の対象が異なっても化合物の分子設計や合成方法については参考になる点が数多くあり、大変有意義であった。分子設計に関しては、旧来の網羅的な構造活性相関による手法のみならず、X 線結晶構造解析やコンピュータ上でのシミュレーションを用いた手法も多く取り入れられており、農薬業界においても医薬と同様に合理的ドラッグデザインと呼ばれる手法が浸透しつつあることを感じ、今後の報告者の研究の方向性に関して大きな刺激を得ることができた。

報告者は 12 日に行われた Discovery and Synthesis のポスターセッションにおいて、「Structure-activity relationship of imidazothiadiazole-type ecdysone agonists for binding to sf-9 cells (sf-9 細胞への結合を指標とした imidazothiadiazole 型脱皮ホルモンアゴニストの構造活性相関)」という題目で発表を行った。以下にその概要を述べる。

昆虫の脱皮はステロイドホルモンである 20-hydroxyecdysone により制御されている。脱皮ホルモンと同様の作用を示す脱皮ホルモンアゴニストは昆虫の正常な生育を攪乱するため殺虫剤としての応用が期待されている。その中でも報告者は 2009 年に報告されたアゴニストである imidazothiadiazole 型の化合物に注目し、その化学構造と脱皮ホルモン様活性の関係 (構造活性相関) を調べた。15 種類の imidazothiadiazole 型化合物を実際に有機合成し、当研究室において確立されたチョウ目昆虫由来の sf-9 細胞を用いた脱皮ホルモン受容体への結合試験を行った。その結果、高い活性を示すために必要な化学構造を明らかにすることができた。

さらに, imidazothiadiazole 類の脱皮ホルモン受容体に対する結合様式をドッキングシミュレーションと呼ばれる手法を用いてコンピュータ上で解析した結果, 得られたモデルは構造活性相関の結果をよく説明するものであり, 今後の構造展開にとり有益なモデルを得ることができた.

本発表に関して, 「この化合物の構造活性相関はどのように解釈できるか」といった質問や, 「この部分を架橋してコンホメーションを固定してはどうか」, 「さらに鎖長を伸ばした化合物のドッキングシミュレーションもやってみてはどうか」といった助言を頂き, 今後の研究にとり有益な意見交換を行うことができた.

今回は報告者にとって初めての国際会議であり, 英語でのディスカッションを行う初めての機会でした. 自身の英語力のなさを痛感する場面も多々ありましたが, それでも世界各国の農薬研究者と意見交換することができ大きな刺激になりました. 今回, 助成金を通じて本国際会議への参加を支援して頂いた貴財団に厚く御礼申し上げます.