

第 40 回構造活性相関シンポジウム プログラム

第 1 日目 (11 月 29 日)

10:30 - 10:35 開会

10:35 - 11:15 一般講演 (会場：りぶらホール)

座長：赤松美紀

KO01 LERE-QSAR 解析による bilinear model の新しい解釈：トリアジン誘導体とジヒドロ葉酸還元酵素との複合体形成

○山内香子, 相原薫, 坂本修平, 杉本拓弥, 吉田達貞, 中馬寛 (徳島大院薬)

KO02 LERE-QSAR 解析の酵素触媒反応への適用：トリプシンによる置換馬尿酸フェニルの加水分解反応のミカエリス・メンテン定数および反応速度定数の定量的解析

○馬島彬, 坂本修平, 杉本拓弥, 吉田達貞, 中馬寛 (徳島大院薬)

11:25 - 12:10 招待講演 (会場：りぶらホール)

座長：清水 良

KI01 ウイルス由来感染機構を有する非ウイルス性 D D S キャリアー：
バイオナノカプセルの開発

黒田俊一 (名古屋大学大学院生命農学研究科)

13:30 - 14:30 一般講演 (会場：りぶらホール)

座長：大田雅照

KO03 ドッキングおよび構造活性相関に基づく脱皮ホルモン受容体結合様式の予測

○蒲池沙織, 瀧本征佑, 赤松美紀, 宮川恒, 多田俊治, 中川好秋 (大阪府大院理, 京大院農)

KO04 ネオニコチノイド系殺虫剤の定量的構造活性相関解析

○西脇寿, 栗山光博, 長岡ひかる, 加藤聡, 赤松美紀, 山内聡, 首藤義博 (愛媛大農, 京大院農)

KO05 非経験的フラグメント分子軌道法を活用した高活性 Protein Kinase CK2 阻害剤の設計

○呉竜英, 侯増燁, 木下誉富, 武井義則, 安江美里, 三須良介, 鈴木大和, 中村真也, 大野浩章, 村田克美, 北浦和夫, 平澤明, 大石真也, 藤井信孝, 仲西功 (近畿大薬, 京大薬, 大阪府大院理)

14:40 - 16:40 ポスターセッション (会場：3 階会議室 301-303)

14:40 - 15:40 奇数番発表

15:40 - 16:40 偶数番発表

16:50 - 17:50 特別講演 (会場：りぶらホール)

座長：高橋由雅

KS01 創薬における安全性評価：毒作用発現とその分子毒性学的考究
堀井郁夫 (ファイザー・昭和大学薬学部)

18:30 - 懇親会 (会場：岡崎ニューグランドホテル)

ポスターセッション [11 月 29 日 14:40 - 16:40] (会場 : 3 階会議室 301-303)

- KP01** 抗炎症フラボノイドの NO 産生抑制作用に関する構造活性相関
大河原充好, 根本崇志, 則武隆佑, 大根谷章浩, 高宮知子, 北中進, ○飯島洋 (日本大薬)
- KP02** IT 創薬技術を用いた Endomorphin-1 の非ペプチド化研究
○酒匂佑介, 神田泰彦, 服部一成, 福西快文, 中村春木 (塩野義製薬, 産総研, 阪大蛋白研)
- KP03** ATP・基質結合部位阻害を目的とした新規 Pim1 阻害剤探索
○幸瞳, 津金沢恵子, Lorien Parker, 田仲昭子, 横山茂之, 本間光貴 (理研 SSBC)
- KP04** 非経験的分子軌道法計算を用いたリレンザおよびその誘導体とインフルエンザ・ノイラミニダーゼとの結合自由エネルギー変化の QSAR 解析 - Fragment Based LERE-QSAR
○的場弘, 比多岡清司, 河野明大, 芝田雄登, 吉田達貞, 中馬寛 (徳島大院薬)
- KP05** β -セクレターゼ阻害剤の Lead Evolution と Optimization: 分子科学計算による薬物-タンパク質間相互作用からの定量的考察
○相原薫, 山内香子, 吉田達貞, 中馬寛 (徳島大院薬)
- KP06** リガンド-タンパク質の複合体形成に及ぼす溶媒効果の検討: LERE-QSAR 解析における水和自由エネルギー項の定量的評価
○比多岡清司, 的場弘, 河野明大, 芝田雄登, 原田政隆, 坂本修平, 吉田達貞, 中馬寛 (徳島大院薬)
- KP07** 新規な in silico FBDD 手法
Hugues-Olivier Bertrand, Hongwei Huang, Jorgen Koska, Jiabo Li, Tien Luu, Jon Sutter, Adrian Stevens, ○高岡雄司, Deqiang Zhang (Accelrys Inc.)
- KP08** FMO+PBSA による DJ-1 リガンド結合エネルギーのインシリコ解析
○重光保博 (長崎工技セ)
- KP09** CYP2B6 の基質認識に対する一塩基多型の影響のドッキングシミュレーションによる評価
○小林佳奈, 小田彰史, 平塚真弘, 山乙教之, 広野修一, 高橋央宜 (東北薬大, 金沢大院薬, 阪大蛋白研, 東北大院薬, 北里大薬)
- KP10** 有機フッ化合物のバクテリアに対する毒性と構造との関係
○三島淳, 森田馨, 石原良美, 高野二郎 (東海大院理)
- KP11** 市販(Q)SAR ソフトによる予測結果の信頼性評価に関する検討
○赤堀有美 (CERI)
- KP12** 異性化アスパラギン酸を含むペプチド基質とヒト PIMT との相互作用様式の推定
○小田彰史, 野地郁彦, 小林佳奈, 高橋央宜, 福吉修一, 中垣良一 (金沢大院薬, 東北薬大, 阪大蛋白研)
- KP13** カテゴリーアプローチによる化学物質の生物濃縮性の評価
○池永裕, 櫻谷祐企, 山田隼 (NITE)
- KP14** オープンアクセス可能な広範な化合物に対応する高等動物への毒性予測システムの検討
○寺本泉瑠, 宇根琢, 岡本晃典, 川下理日人, 高木達也 (阪大院薬, 阪大薬, 阪大微生物病研)
- KP15** CYP2D6.1 (野生体型) / CYP2D6.17 (変異体型) 阻害に関するイン・シリコ予測研究
○半田耕一, 中込泉, 山乙教之, 合田浩明, 広野修一 (北里大薬, 富山化学工業)

- KP16** Sucrase 及び Isomaltase への LAB 化合物の結合様式に関する理論的研究
○小関準, 中込泉, 足立伊佐雄, 加藤敦, 広野修一 (北里大薬, 富山大病院薬)
- KP17** イン・シリコ創薬技術に基づいたヒトセリンラセマーゼ阻害剤の創製研究
○合田浩明, 和田亮吾, 李杰, 帯田孝之, 水口峰之, 森寿, 豊岡尚樹, 広野修一 (北里大薬, 富山大院理工, 富山大院薬, 富山大院医)
- KP18** α -glucosidase 阻害剤 α -1-C-Butyl-LAB の Maltase への結合様式に関する理論的研究
○中込泉, 小関準, 足立伊佐雄, 山乙教之, 合田浩明, 加藤敦, 広野修一 (北里大薬, 富山大病院薬)
- KP19** 酵素リゾチームに対するリガンド分子の結合サイト:分子力学計算と等温滴定カロリメトリー
○松浦誠, 田浦俊明 (愛知県立大院情報)
- KP20** NTG スーパーグラフを利用したリード骨格の探索
○大西貴之, 高橋由雅 (豊橋技科大院工)
- KP21** 分子進化計算を用いた創薬候補化学構造設計システムの開発
○守國拓史, 高橋由雅 (豊橋技科大院工)
- KP22** GPCRSARfari データに基づくリガンド/GPCR 相互作用の予測
○菅谷昇義 (ファルマデザイン)
- KP23** バイオインフォマティクス観点からのターゲットタンパク質に対するリガンド結合部位の探索方法の開発
○吉山晃太郎, 松岡美里, 加納和彦, 小松克一郎, 梅山秀明, 岩舘満雄 (中央大理工, 国立感染症研, 北里大理)
- KP24** ホモロジーモデリング法の複数のコンセンサス法による構造選択の評価と二次構造相対配置最適化
○佐藤亘, 宮下貴弘, 梅山秀明, 岩舘満雄 (中央大理工)
- KP25** 精練過程の自動化による大規模データベースからの基本活性構造抽出
○高田直人, 大森紀人, 岡田孝 (関学大院理工)
- KP26** 基本活性構造を用いた副作用のシグナル検出
○大森紀人, 吉岡祐一, 加藤祐樹, 岡田孝 (関学大院理工)
- KP27** 副作用に関わる基本活性構造の頻出部分グラフマイニング法による抽出
○中尾寛郎, 猪口明博, 大森紀人, 阿部武丸, 岡田孝, 鷲尾隆 (関学大院理工, 阪大産研)
- KP28** 遺伝的アルゴリズムを用いた分子ライブラリデザインシステムの開発
○森本孝朗, 加藤博明 (豊橋技科大院工)
- KP29** 近傍フラグメント表現に基づくタンパク質配列特徴解析システムの開発
○永松晃一, 加藤博明 (豊橋技科大院工)
- KP30** 予備的化合物選択のためのリガンドベースバーチャルスクリーニング手法の開発
(その2):フィンガープリントと記述子を組み合わせた化合物選択手法の開発と評価
○郡司久恵, 関達徳, 山崎広之, 西端芳彦 (北里大薬)
- KP31** ヒト主要 P450 分子種によるモデル化合物 Tebufenozide の代謝物同定および In Silico 予測
○矢川勝太, 城谷直紀, 十川萌, 生城真一, 榊利之, 原田俊幸, 宮川恒, 平井伸博, 赤松美紀 (京大院農, 富山県立大工)
- KP32** Biological Evaluation on New Inhibitors of Indoleamine 2, 3-Dioxygenase
○李昕, 田中実, 滝川修, 横山祐作 (東邦大薬, 長寿研)

第2日目 (11月30日)

9:30 - 10:50 一般講演 (会場：りぶらホール)

座長：久保寺英夫

- KO06** A Combined QM/MM (ONIOM) and QSAR Approach to the Study of Complex Formation of Matrix Metalloproteinase-9 with a Series of Biphenylsulfonamides -LERE QSAR Analysis-
○吉田達貞, 比多岡清司, 馬島彬, 杉本拓弥, 的場弘, 坂本修平, 野々下航, 林敬久, 中馬寛 (徳島大院薬)

- KO07** ジアゼピン化合物の軸不斉エネルギー障壁の高精度・高速モンテカルロシミュレーションによる推算
○森上賢治, 射手園佳子, 西本昌弘, 大田雅照 (中外製薬)

座長：山下富義

- KO08** 反応前駆体を考慮に入れた毒性予測 QSAR 式の開発
○古濱彩子, 青木康展, 白石寛明 (国立環境研)

- KO09** ToxBay: ベイジアンネットによる反復投与毒性評価システム
○岡田孝, 大森紀人, 堀川裕志, 山川眞透, 森幸雄, 櫻谷祐企, 山田隆志, 阿部武丸, 山添康, 林真 (関学大理工, NITE, 東北大薬, 安評センター)

11:10 - 12:10 一般講演 (会場：りぶらホール)

座長：本間光貴

- KO10** 分子進化アルゴリズムを利用した薬物の構造設計

○河合健太郎, 永田尚也, 高橋由雅 (科研製薬, 豊橋技科大院工)

- KO11** 情報学的スクリーニングによる自己免疫疾患遺伝子とその FAMS を用いた複合体モデリングおよびインシリコスクリーニング
○岩舘満雄, 田口善弘, 梅山秀明 (中央大理工)

- KO12** 蛋白質-リガンド複合体データベースからのフラグメント同定と化合物 3 次元データベース検索に基づくリード探索法の開発
○山乙教之, 広野修一 (北里大薬)

13:30 - 14:50 一般講演 (会場：りぶらホール)

座長：飯島 洋

- KO13** ヒト酸性キチナーゼを標的とした新規喘息治療薬開発を目指したイン・シリコ創薬研究
○若杉昌輝, 合田浩明, 廣瀬友靖, 菅原章公, 山本剛, 塩見和朗, 砂塚敏明, 大村智, 広野修一 (北里大薬, 北里生命科学研)

- KO14** タンパク質立体構造データベースに対する高速類似部分構造検索法の開発
○寺師玄記, 渋谷哲朗, 竹田-志鷹真由子 (北里大薬, 東大医科研)

座長：粕谷 敦

- KO15** Short chain dehydrogenase/reductase ファミリタンパク質の構造進化
○前田美紀 (農業生物資源研)

- KO16** 機械学習を用いた induced fit 部位の予測と kinase DFG loop などへの応用
○高谷大輔, 佐藤朋広, 幸瞳, 田仲昭子, 本間光貴, 横山茂之 (理研(横浜))

15:00 - 15:45 招待講演（会場：りぶらホール）

座長：藤原英明

KI02 複合糖質の構造生物学：創薬標的としての糖鎖

加藤晃一（自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター・
名古屋市立大学大学院薬学研究科）

15:45 - 15:50 閉会