

第 42 回構造活性相関シンポジウム プログラム

第 1 日目 (11 月 13 日)

10:00 - 10:05 開会

10:05 - 11:05 一般講演 (会場：プラザホール)

座長：宮本秀一

- KO01** 分子動力学シミュレーションを用いた野生型・変異型 CYP1A2 の立体構造および構造柔軟性の予測
(¹金沢大院医薬保, ²東北大院薬, ³北里大薬, ⁴大阪大蛋白研) ○渡邊友里江¹, 福吉修一¹, 伊藤雅², 平塚真弘², 山乙教之³, 広野修一³, 小田彰史^{1,4}
- KO02** 分子科学計算を用いたチオリダジンの CYP2D6 による代謝過程の非経験的解析 (I)
(徳島大院薬) 笹原克則, 馬島彬, ○吉田達貞, 中馬寛
- KO03** 環境中における化学物質分解性予測システムの構築
(¹大阪大院薬, ²大阪大微生物病研究所) ○宇根琢¹, 岡本晃典¹, 宮崎大貴¹, 川下理日人^{1,2}, 高木達也^{1,2}

11:15 - 12:05 招待講演 (会場：プラザホール)

座長：永田尚也

- KI01** 生きた細胞内での蛋白質の立体構造とダイナミクス
(首都大学東京 理工学研究科) 池谷鉄兵

13:30 - 14:30 一般講演 (会場：プラザホール)

座長：高木達也

- KO04** イミダゾール系脱皮ホルモンアゴニストの構造活性相関
(京都大院農) ○横井大洋, 南沙紀, 石塚千遥, 中川好秋, 宮川恒
- KO05** イミダゾリジン環 5 位に種々の置換基を有するイミダクロプリド類縁体の合成と構造活性相関解析
(¹愛媛大農, ²京都大院農) ○西脇寿¹, 長岡ひかる¹, 赤松美紀², 山内聡¹, 首藤義博¹
- KO06** 超偏極 Xe MRI による慢性閉塞性肺疾患 (COPD) の前臨床評価
(¹大阪大医, ²京都大工) ○木村敦臣¹, 山内紬起子¹, 奥村慎一郎¹, 今井宏彦², 藤原英明¹

14:40 - 16:40 ポスターセッション (会場：ホワイエ)

14:40 - 15:40 奇数番発表

15:40 - 16:40 偶数番発表

17:00 - 18:00 特別講演 (会場：プラザホール)

座長：今井輝子

KS01 薬物性肝障害の多様性への対応と予測
(名古屋大学大学院医学系研究科) 横井毅

18:30 - 懇親会 (会場：ホテルニューオータニ熊本)

ポスターセッション [11月13日 14:40-16:40] (会場: ホワイエ)

- KP01** 8-Hydroxy-2-imino-2H-chromene-3-carboxamide 骨格を有するカルボニル還元酵素 (CBR1) 阻害剤の構造活性相関
(¹岐阜薬大, ²富山大, ³岐阜大, ⁴昭和大) ○宮城菜未希¹, 胡大イ², 遠藤智史¹, 荒井裕貴¹, 松永俊之¹, 五十里彰¹, 桑田一夫³, 原明³, 合田浩明⁴, 豊岡尚樹²
- KP02** 強力な PDE7 阻害活性を有する新規チエノピリミジノン誘導体の創製 (科研製薬) ○遠藤勇介, 河合健太郎, 浅野武司, 天野世治, 澤田圭輔, 上尾紀子, 高橋伸明, 園田陽, 亀井準乏, 永田尚也
- KP03** 阻害剤耐性変異体チロシンキナーゼと阻害剤との相互作用の解析
(¹熊本大薬, ²北海道大, ³イエール大学) ○与座魁斗¹, 小橋川敬博¹, 森岡弘志¹, 天野伸治郎², 横川真梨子², Joseph Schressinger³, 稲垣冬彦²
- KP04** 物理化学的手法を用いた DJ-1 小分子化合物スクリーニング
(¹東京大院新領域, ²東京大院工, ³東京大オープンイノベーションセンター, ⁴東京大医科研) ○田代晋也¹, Jose Martinez Caaveiro², 長門石暁^{2,3}, 津本浩平^{1,4}
- KP05** ヒトおよびサルカルボキシエステラーゼ 2 酵素の 1 アミノ酸変異による基質結合部位の構造変化と基質認識性の相違
(¹熊本大院薬, ²アスピオファーマ, ³熊本大薬, ⁴産総研) ○井川佳之^{1,2}, 藤原斉也³, 西澤遥³, 大浦華代子³, 広川貴次⁴, 今井輝子³
- KP06** 原子フラグメント法を用いた化学物質の魚毒性予測: 汎用パラメータと個別パラメータ
(豊橋技術科学大学) ○池上裕二, 高橋由雅
- KP07** フェニル酪酸ナトリウムの血清アルブミン結合特性に関する基礎的検討 (崇城大薬) ○山崎啓之, 榎田泰介, 岡本侑子, 田口和明, 宮本秀一, 瀬尾量, 小田切優樹
- KP08** 新規糖尿病治療薬としての SHIP2 選択的阻害剤の *in silico* 創薬研究
(¹北里大薬, ²昭和大薬) ○小澤新一郎¹, 合田浩明², 広野修一¹
- KP09** タンパク質中のリガンド結合部位の部分類似性解析
(北里大薬) ○山乙教之, 広野修一
- KP10** 分子動力学法による小さいタンパク質の立体構造の推定
(¹金沢大院医薬保, ²阪大蛋白研) ○小田彰史^{1,2}, 福吉修一¹
- KP11** 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 4): 構造フィンガープリントの改良
(北里大薬) 郡司久恵, ○西端芳彦
- KP12** ChEMBL を用いた 3D 重ね合わせデータベース構築と構造変換への応用 (理研 CLST) ○橋本憲明, 幸瞳, 本間光貴
- KP13** 触媒反応機構に基づいたインフルエンザ・ノイラミニダーゼとシアル酸誘導体との相互作用解析
(徳島大院薬) ○芝田雄登, 吉田達貞, 中馬寛
- KP14** 馬尿酸フェニルエステルのシステインとセリンプロテアーゼの加水分解反応の分子科学計算による詳細解析 (I)
(徳島大院薬) ○倉橋昌大, 馬島彬, 吉田達貞, 中馬寛

- KP15** HIV-1 プロテアーゼとアロフェニルノルスタチン骨格を持つ化合物との複合体の分子科学計算を用いた精密相互作用解析
(徳島大院薬) ○林敬久, 野脇静, 吉田達貞, 中馬寛
- KP16** 詳細な非結合相互作用認識の Fingerprint としての利用
(¹アクセルリス株式会社, ²BIOVIA corporate) ○高岡雄司¹, Dan Berard², Helen Kemmish², Jurgen Koska², Tien Luu², Noj Malcolm², Katalin Nadassy², Jon Sutter², Adrian Stevens²
- KP17** FMO 法と PLS 回帰による新規 QSAR
(北里大薬) ○吉田智喜, 広野修一
- KP18** Fragment Based Drug Discovery (FBDD) vs Molecular Evolution: Shared Strategy for the Induction of Substrate/Target Selectivity
(シュレーディングー株式会社) ○市原収, Roy 木村
- KP19** 3次元 RISM 理論に基づいたバルナーゼ-バルスター複合体の結合能評価
(北里大薬) ○清田泰臣, 崔成美, 竹田-志鷹真由子
- KP20** Protein active site comparison with SiteHopper: phylogeny to polypharmacology
(¹オープンアイ・ジャパン株式会社, ²OpenEye Scientific Software Inc.) ○佐藤秀行¹, Gregory Warren², Paul Hawkins², J Michael Word², Tom Darden², Robert Tolbert²
- KP21** 新規 P2X3 受容体アンタゴニストの研究 -ホモロジーモデルを用いたピロリノン誘導体の構造活性相関-
(塩野義製薬) 栗原奈緒子, ○旭健太郎, 神田泰彦, 飛永裕之, 亀山貴之, 甲斐浩幸
- KP22** コドン縮約表現に基づくタンパク質-遺伝子配列モチーフ解析システムの開発
(豊橋技科大院工) ○山本潤基, 加藤博明
- KP23** Short chain dehydrogenase/reductase ファミリ蛋白質の構造進化
(生物研) ○前田美紀
- KP24** β-glucocerebrosidase に対する高親和性リガンド calystegineB2 類縁体の計算化学的相互作用解析
(¹北里大薬, ²富山大病院薬) ○中込泉¹, 加藤敦², 山乙教之¹, 足立伊左雄², 広野修一¹
- KP25** 大規模バーチャルスクリーニングデータを利用したオフターゲット探索
(アスピオファーマ) ○国本亮, 岡本敦之
- KP26** 三次元近傍情報に基づく分子の構造特徴解析システムの開発
(豊橋技科大院工) ○佐賀勇哉, 加藤博明
- KP27** 分子行列の固有ベクトルと分子内局所環境の相関
(豊橋技術科学大学) ○森亮真, 高橋由雅
- KP28** 医薬品統合データベースの作成と ATC コードによる横紋筋融解症の解析
(関西学院大理工) ○大森紀人, 堀川裕志, 岡田孝
- KP29** 創薬化学者のための構造変換データベース CUES: Convert it Unique and Elegant Substructure の開発と応用
(¹帝人ファーマ, ²理研) ○熊澤啓子¹, 佐々木俊太¹, 幸瞳², 本間光貴²

第2日目 (11月14日)

9:30 - 10:30 一般講演 (会場：プラザホール)

座長：本間光貴

- KO07** リガンドタンパク質の複合体形成における分散力相互作用の検討: LERE-QSAR 解析における結合相互作用エネルギー項の定量的評価
(徳島大院薬) ○吉田達貞, 林敬久, 倉橋昌大, 馬島彬, 笹原克則, 中馬寛
- KO08** TACE と γ -ラクタムヒドロキサム酸誘導体の LIE 解析および LERE-QSAR 解析と検証
(徳島大院薬) ○野々下航, 濱野綾那, 岸優作, 吉田達貞, 中馬寛
- KO09** 残基間相互作用に基づく新たなタンパク質構造アライメント法の開発
(北里大薬) ○寺師玄記, 竹田一志鷹真由子

10:30 - 11:10 依頼講演 (会場：プラザホール)

座長：岡島伸之

- KR01** KINOMEScan データに基づいたベイジアン予測システムによる新規キナーゼ標的に対する選択的キナーゼ阻害剤の創製
(中外製薬研究本部) 長谷川清, 堺谷政弘, ○大田雅照, 三尾俊之, 中西義人, 大和田潤, 服部一夫, 小野尚美, 根東攝

11:20 - 12:10 招待講演 (会場：プラザホール)

座長：山下富義

- KI02** Molecular docking simulations in the era of network pharmacology
(沖縄科学技術大学院大学) Kun-Yi Hsin

13:30 - 14:10 一般講演 (会場：プラザホール)

座長：中川好秋

- KO10** 味覚修飾タンパク質の酸による甘味発現機構の解析
(¹新潟薬大応生, ²東京大院農) ○大久保崇之¹, 中嶋健一朗², 伊藤啓祐², 三坂巧², 阿部啓子², 田宮実¹, 石黒正路¹
- KO11** 自己組織化ヘパリン誘導体の抗炎症作用と構造活性相関
(京都大院薬) ○山下富義, Hasan Baba-zada, 橋田充

14:10 - 14:50 一般講演 (会場：プラザホール)

座長：赤松美紀

- KO12** Staphylococcus aureus 莢膜合成酵素 CapF と低分子化合物の物理化学的な相互作用解析
(¹東京大院工, ²東京大 OCDD, ³東京大院新領域, ⁴東京大医科研) ○長門石曉^{1,2}, 中納広一郎³, 宮房孝光³, Manuel Martinez Caaveiro Jose¹, 津本浩平^{1,4}

KO13 チロシンキナーゼのリン酸化による活性化の構造メカニズム
(¹熊本大院薬, ²北海道大, ³イエール大学) ○小橋川敬博¹, 天野伸治郎²,
横川真梨子², 森岡弘志¹, Joseph Schressinger³, 稲垣冬彦²

15:00- 15:50 招待講演 (会場: プラザホール)

座長 : 大田雅照

KI03 X線結晶構造解析による酵素反応機構の解明
(熊本大学大学院生命科学研究部) 山縣ゆり子

15:50- 15:55 閉会