

第 51 回構造活性相関シンポジウム プログラム

1 日目：11 月 20 日（月）

9:00 開場、参加登録開始

10:00-10:10 開会式

10:10-10:50 口頭発表（KO01 — KO02）

座長：高谷大輔（大阪大学）

座長補佐：原田俊幸（住友化学）

KO01 ラフィノース合成酵素 2 はスタキオース合成活性を持つのか？

○前田美紀¹、戸田恭子¹、加賀秋人²（¹農研機構・資源研、²農研機構・作物研）

KO02 肺炎連鎖球菌成長制御蛋白質の相互作用解析

○下山紘充（野口研）

10:50-11:00 休憩

11:00-11:40 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各 1 分）

進行：前田美紀（農研機構）

11:40-13:10 昼休憩、ポスター掲示（11/20 11:40 – 11/21 13:00 掲示必須）

13:10-14:10 招待講演

座長：吉野龍ノ介（筑波大学）

座長補佐：工藤玄巳（筑波大学）

KI01 AlphaFold によってさらに発展するタンパク質の計算科学

森脇由隆（東京大院・農）

14:10-14:20 休憩

14:20-15:20 招待講演

座長：本間光貴（理化学研究所）

座長補佐：杉本 学（熊本大学）

KI02 AI・ビッグデータ時代の創薬の可能性

山西芳裕（名古屋大院・情報）

15:20-17:20 ポスター発表（KP01 — KP40）

* 偶数ポスター番号のコアタイムは 15:20-16:20

* 奇数ポスター番号のコアタイムは 16:20-17:20

KP01* 新たなグリコシダーゼ阻害剤デザインの提案と難病ポンペ病治療薬への応用

○岡田卓哉^{1,2}、加藤敦³、中込泉⁴、喜瀬真妃³、田中信忠⁴、Robert J. Nash⁵、George W. J. Fleet⁶、小林陽太¹、池田隼人²、豊岡尚樹^{1,2}（¹富山大院・医・薬理工、²富山大院・理工、³富山大病院・薬、⁴北里大・薬、⁵Aberystwyth 大、⁶Oxford 大）

KP02* SARS-CoV-2メインプロテアーゼとエンシトレルビルの複合体に対するvirtual alanine scanによる1残基の変異が立体構造に与える影響の予測

○水野文人¹、仲吉朝希^{1,2}、加藤紘一^{1,3}、栗本英治¹、小田彰史^{1,4}（¹名城大・薬、²広島市大院・情報、³湘南医療大・薬、⁴阪大・蛋白研）

KP03 薬物動態学的増強因子としての新規ベンジルオキシフェニルイミダゾール誘導体

○河合健太郎、軽尾友紀子、樽井敦、佐藤和之、表雅章、山下伸二、片岡誠（摂南大・薬）

KP04* 抗がん活性および鎮痛作用が期待される新規 Nr4a1 アンタゴニストの創製と構造—活性相関

○大島咲貴¹、吉田葵²、伊東樹穂³、小林千紘²、磯芹奈²、牧野新菜³、金山大介²、岡田卓哉^{1,2,3}、小田友里江⁴、合田浩明⁴、高崎一朗^{1,2,3}、豊岡尚樹^{1,2,3}（¹富山大院・医・薬理工、²富山大院・理工、³富山大・工、⁴昭和大）

KP05* ベンズブロマロンをシード化合物とした指定難病アミロイド病治療薬の開発研究

○高橋佳乃子¹、中川裕介²、藤井香奈子³、鍋島裕子⁴、Nguyen Ngoc Thanh Luan²、岡田卓哉^{1,2}、横山武司^{3,4}、水口峰之^{2,3,4}、豊岡尚樹^{1,2}（¹富山大院・医薬理工、²富山大院・生命融合、³富山大院・総合医薬学、⁴富山大・薬）

- KP06* 電子状態インフォマティクスによる α -グルコシダーゼ阻害剤の探索
○立石優輔、杉本学（熊本大院）
- KP07* ヒスチジン二残基を軸配位子とするヘムbの分子力場パラメータの決定と検証
○仲吉朝希^{1,2}、近藤寛子^{1,3}、酒井友紀菜³、兼松佑典^{1,4}、新井博文³、鷹野優¹（¹広島市大院・情報、²名城大・薬、³北見工大・工、⁴広島大院・先進理工）
- KP08 ADME予測における公共データに基づく深層学習モデルに対するin house測定データを用いた転移学習の効果
○佐藤朋広、幸瞳、本間光貴（理研）
- KP09 創薬研究開発における調査・分析手法の紹介
○保田真友子（理研）
- KP10 互変異性体を考慮にいた農薬等に対するインシリコによる変異原性評価
○古濱彩子、亀山暁子、中村公亮、堤智昭、杉山圭一（国立衛研）
- KP11* 半経験的手法と機械学習を併用した薬物代謝部位予測
○塩竹悠人、齋藤徹（広島市大院・情報）
- KP12 相互作用を効率よくFMO法で算出するための最適な切り出しモデルの検討
○中村真也¹、赤木辰央^{1,2}、西脇敬二¹、中谷翠¹、川瀬裕二¹、高橋悠希¹、仲西功¹（¹近畿大・薬、²日本たばこ産業(株)）
- KP13* スーパーコンピュータ富岳を用いたMDベースのハイスループットスクリーニング
○鍋谷朋哉¹、浴本亨^{1,2}、山根努³、池口満徳¹（¹横浜市大・理、²横浜市大・生命医科学、³理研・計算科学研究セ）
- KP14* 膜内切断プロテアーゼRsePの分子動力学シミュレーション
○田中健太¹、浴本亨¹、山根努²、禾晃和¹、池口満徳^{1,2}（¹横浜市大・生命医科学、²理研・計算科学研究セ）
- KP15* Multiple ligands docking を用いた STING を標的とした新規ヒット化合物の探索
○戸板太陽¹、石田祥一²、浴本亨²、池口満徳²、出水庸介^{2,3}、辻巖一郎³、寺山慧²（¹横浜市大・理、²横浜市大・生命医、³国立衛研）

- KP16* 木探索分子動力学法 (TS-MD) によるヒドロキシカルボン酸受容体 (HCAR2) –
ナイアシン結合過程の索
○中居雪菜¹、浴本亨¹、山根努²、寺山慧¹、朴三用¹、池口満徳¹ (¹横浜市大院・
生命医、²理研・R-CCS)
- KP17 タンパク質-タンパク質相互作用におけるアミノ酸認識パターン
○山乙教之、梁貴博、松尾彩加、安井莉理、田中信忠 (北里大・薬)
- KP18 酸性 α -グルコシダーゼに対するシャペロン化合物 5-C-alkyl-L-ido-
Deoxynojirimycin のアルキル鎖長が活性や結合配向に及ぼす影響
○中込泉¹、加藤敦²、吉村洸亮²、兼清 歌²、山乙教之¹、田中信忠¹ (¹北里大・
薬、²富山大・薬)
- KP19* 分子動力学計算による PAC1R–Maxadilan 複合体の溶液構造解析
○渡邊友里江、早川大地、合田浩明 (昭和大・薬)
- KP20 二環式ペプチド KS-133 とクラス B GPCR である VIPR2 の結合メカニズムの解明
と VIPR2 における機能的 S-S 結合の発見
○坂元孝太郎¹、浅野智志²、吾郷由希夫²、広川貴次³ (¹一丸ファルコス(株)、²広
島大、³筑波大)
- KP21* バーチャルスクリーニングモデル作成のための Parallel Cascade Selection
Molecular Dynamics の応用
○平尾巧¹、工藤玄己²、吉野龍ノ介³、広川貴次³ (¹筑波大・医科学、²筑波大・
物理、³筑波大・医学医療系・TMRC)
- KP22* 新規 DPP8 阻害剤の開発を目的としたフラグメントベースバーチャルスクリーニ
ング
○小澤新一郎、彌田桃香、佐々木瑠梨、田中信忠 (北里大・薬)
- KP23 水和サイト解析を用いた多剤耐性菌 *Stenotrophomonas maltophilia* DPP7 阻害剤
のバーチャルスクリーニング
○吉田智喜、杉本若葉、田中信忠 (北里大・薬)
- KP24 COMBINE 法と 3D-QSAR 法を用いた結合自由エネルギー推算の研究
○池上貴史、木村嘉朗 ((株) モルシス)

- KP25 FMO 計算の残基間相互作用に着目した P38 MAPK の阻害活性予測
○西條航¹、瀬川颯²、川下理日人¹ (1近畿大院、²奈良先端大)
- KP26 フラグメント分子軌道法を用いた SARS-CoV-2 スパイクタンパク質の HR1/HR2 領域の相互作用解析
○阪本直人、川下理日人 (近畿大院・総合理工)
- KP27 MD シミュレーションを用いた IL-17RA 結合時における IL-17A ホモダイマーの構造変化解析
○伊丹すず、川下理日人 (近畿大院・総合理工)
- KP28 フラグメント分子軌道法を活用した代謝型グルタミン酸受容体 5 阻害剤の分子設計
○小田島大貴¹、宮川柊兵¹、半田佑磨¹、古石誉之¹、米持悦生¹、佐藤朋広²、幸瞳²、本間光貴²、高谷大輔³、上村みどり^{3,4}、福澤薫^{1,3} (1星薬大、²理研、³阪大院・薬、⁴CBI 研究機構)
- KP29* 電子状態インフォマティクスによるリガンド-タンパク質相互作用エネルギーの予測と分子スクリーニングへの応用
○横山美桜¹、立石優輔²、杉本学 (1熊本大工、²熊本大院)
- KP30* 電子状態インフォマティクスによるグルタチオン抱合の反応位置選択性の予測
○堤友佑、杉本学 (熊本大院)
- KP31 Hit-to-Lead を指向したリガンド伸長始点と伸長サイトの予測手法開発
○工藤玄己¹、平尾巧²、吉野龍ノ介³、重田育照⁴、広川貴次³ (1筑波大・物理、²筑波大・医科学、³筑波大・医学医療系・TMRC、⁴筑波大・CCS)
- KP32 拡張アンサンブル法を用いたPROTACリンカー設計のための三元複合体構造探索
○吉野龍ノ介¹、工藤玄己²、平尾巧³、広川貴次¹ (1筑波大・医学医療系・TMRC、²筑波大物理、³筑波大医科学)
- KP33 タンパク質構造上の疾患関連変異クラスタに基づく新規機能部位探索
○本野千恵¹、土方敦司²、広川貴次³、今井賢一郎¹ (1産総研細胞分子、²東薬大生命科学、³筑波大医学医療系)
- KP34 生態毒性予測 QSAR モデル KATE2020 について構造に関する適用領域に着目し

た予測性能評価

○伊丹悠人、大野浩一、濱田昌雄、後藤碧、佐藤理絵、小田重人、山本裕史（国立環境研）

KP35* 電子状態インフォマティクスによる医薬品の活性・毒性予測の高速化/汎用化に関する検討

○相川友佑、立石優輔、杉本学（熊大院・理）

KP36 生成された化学構造に対するフィルタリングの検討

○幸瞳（理研 BDR）、清水祐吾（理研 R-CCS）、池田和由（理研 R-CCS）本間光貴（理研 BDR）

KP37 「自律型（オートノマス）化学研究」における大規模生成 AI の適用可能性に関する考察

○湯田浩太郎（(株) インシリコデータ）

KP38* メイラード反応初期段階におけるシッフ塩基形成反応の量子化学計算による解析

○加藤紘一¹、仲吉朝希²、篠原康郎³、栗本英治⁴、小田彰史⁴、石川吉伸¹（¹湘南医療大・薬、²広島市立大院・情報、³金城学院大・薬、⁴名城大・薬）

KP39* Asn残基の非酵素的脱アミド化における隣接するPhe残基の影響についての量子化学計算による解析

○浅井遥¹、加藤紘一²、仲吉朝希³、栗本英治⁴、小田彰史⁴、福石信之¹（¹金城学院大・薬、²湘南医療大・薬、³広島市立大院・情報、⁴名城大・薬）

KP40 FMO 法による抗原抗体相互作用の解析

○竹本千重、渡邊千鶴、本間光貴（理研 BDR）

17:20-17:30 会場移動(時間調整)

17:30-19:30 懇親会

2日目：11月21日（火）

9:00 開場

9:30-10:10 口頭発表（KO03 — KO04）

座長：河合健太郎（摂南大学）

座長補佐：高谷大輔（大阪大学）

KO03* タンパク質鍵穴のハロゲン結合サイトをマッピングする計算法の妥当性評価

○早川大地、渡邊友里江、合田浩明（昭和大・薬）

KO04* 複数の特性予測モデルの信頼性を考慮した分子の多目的最適化

○吉澤竜哉¹、石田祥一¹、佐藤朋広²、大田雅照³、本間光貴²、寺山慧^{4,5,6}（¹横浜市立大・生命医科学、²理研・生命機能科学セ、³理研・計算科学セ、⁴横浜市立大・生命医科学、⁵理研・革新知能統合セ、⁶東京工大・元素戦略MDXセ）

10:10-10:50 口頭発表（KO05 — KO06）

座長：本間光貴（理化学研究所）

座長補佐：幸 瞳（理化学研究所）

KO05* 化学言語モデルが多様な化合物構造を学習する過程の理解

○水野忠快、吉開泰裕、楠原洋之（東京大・薬）

KO06 化学反応を考慮したフィンガープリントの開発

○大川和史、杉本学（熊本大）

10:50-11:00 休憩

11:00-12:00 特別講演

座長：広川貴次（筑波大学）

座長補佐：竹田一志鷹真由子（北里大学）

KS01 変化、進化、深化に適応し、促進するための技術としてのインシリコ創薬

大田雅照（理研・計算科学セ）

12:00-13:30 昼休憩

13:30-14:10 口頭発表 (KO07 — KO08)

座長：古濱彩子 (国立医薬品食品衛生研究所)

座長補佐：川下理日人 (近畿大学)

KO07 分子動力学シミュレーションによる ITK 阻害剤の立体構造選択性の解析

○小川直樹^{1,2}、大田雅照³、池口満徳^{1,3} (¹横浜市大・生命医、²日本たばこ産業、³理研)

KO08 電子状態インフォマティクス手法の拡張と応用

○杉本学、立石優輔、堤友佑、内田悠希、相川友佑、横山美桜、大川和史 (熊本大院)

14:10-15:10 招待講演

座長：西ヶ谷有輝 (アグロデザイン)

座長補佐：原田俊幸 (住友化学)

KI03 転写制御と環状ペプチドの構造生物学

仙石徹 (横浜市立大・医)

15:10-15:20 休憩

15:20-16:20 口頭発表 (KO09 — KO11)

座長：大田雅照 (理化学研究所)

座長補佐：合田浩明 (昭和大学)

KO09 原核生物のタンパク質分解酵素 ClpP の誤作動を誘起するアシルデプシペプチドの構造活性相関研究

○石川文洋、正林直人、秋永修佑、中村真也、仲西功、田邊元三 (近畿大・薬)

KO10* イソキサゾール環を持った新規キチン合成阻害剤の構造活性相関

○森湖太郎¹、宮下正弘¹、池口満徳²、森聡一朗³、柴田哲男³、中川好秋¹ (¹京都市大・農、²横浜市大・生命医科学、³名工大・工)

KO11* タンパク質-タンパク質相互作用をターゲットとした感染阻害大環状物質の探索と構造活性相関解析

○米澤朋起¹、清水祐吾²、池田和由^{1,2}、山本雄一朗³、野口耕司³、酒井祥太⁴、深澤征義⁴、横川真梨子¹、大澤匡範¹（¹慶應大・薬、²理研、³東京理科大・薬、⁴国立感染研・細胞化学）

16:20-16:30 閉会式