

## 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  
(<sup>1</sup>金沢大院医薬保, <sup>2</sup>東北大院薬, <sup>3</sup>北里大薬, <sup>4</sup>大阪大蛋白研) ○渡邊友里江<sup>1</sup>, 福吉修一<sup>1</sup>, 伊藤雅<sup>2</sup>, 平塚真弘<sup>2</sup>, 山乙教之<sup>3</sup>, 広野修一<sup>3</sup>, 小田彰史<sup>1,4</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>大阪大院薬, <sup>2</sup>大阪大微生物病研究所) ○宇根琢<sup>1</sup>, 岡本晃典<sup>1</sup>, 宮崎大貴<sup>1</sup>, 川下理日人<sup>1,2</sup>, 高木達也<sup>1,2</sup>

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  
(<sup>1</sup>愛媛大農, <sup>2</sup>京都大院農) ○西脇寿<sup>1</sup>, 長岡ひかる<sup>1</sup>, 赤松美紀<sup>2</sup>, 山内聡<sup>1</sup>, 首藤義博<sup>1</sup>
- KO06** 超偏極 Xe MRI による慢性閉塞性肺疾患 (COPD) の前臨床評価  
(<sup>1</sup>大阪大医, <sup>2</sup>京都大工) ○木村敦臣<sup>1</sup>, 山内紬起子<sup>1</sup>, 奥村慎一郎<sup>1</sup>, 今井宏彦<sup>2</sup>, 藤原英明<sup>1</sup>

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）

## 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  $\gamma$ -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  
(北里大院薬) ○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  
(<sup>1</sup>新潟薬大応生, <sup>2</sup>東京大院農) ○大久保崇之<sup>1</sup>, 中嶋健一朗<sup>2</sup>, 伊藤啓祐<sup>2</sup>, 三坂巧<sup>2</sup>, 阿部啓子<sup>2</sup>, 田宮実<sup>1</sup>, 石黒正路<sup>1</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>東京大院工, <sup>2</sup>東京大 OCDD, <sup>3</sup>東京大院新領域, <sup>4</sup>東京大医科研) ○長門石曉<sup>1,2</sup>,

中納広一郎<sup>3</sup>, 宮房孝光<sup>3</sup>, Manuel Martinez Caaveiro Jose<sup>1</sup>, 津本浩平<sup>1,4</sup>  
**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  
(<sup>1</sup>熊本大院薬, <sup>2</sup>北海道大, <sup>3</sup>イエール大学) ○小橋川敬博<sup>1</sup>, 天野伸治郎<sup>2</sup>,  
横川真梨子<sup>2</sup>, 森岡弘志<sup>1</sup>, Joseph Schressinger<sup>3</sup>, 稲垣冬彦<sup>2</sup>

**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