

ポスターセッション [第 1 日目 (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  
(<sup>1</sup>岐阜薬大, <sup>2</sup>富山大, <sup>3</sup>岐阜大, <sup>4</sup>昭和大) ○宮城菜未希<sup>1</sup>, 胡大イ<sup>2</sup>, 遠藤智史<sup>1</sup>, 荒井裕貴<sup>1</sup>, 松永俊之<sup>1</sup>, 五十里彰<sup>1</sup>, 桑田一夫<sup>3</sup>, 原明<sup>3</sup>, 合田浩明<sup>4</sup>, 豊岡尚樹<sup>2</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>熊本大薬, <sup>2</sup>北海道大, <sup>3</sup>イエール大学) ○与座魁斗<sup>1</sup>, 小橋川敬博<sup>1</sup>, 森岡弘志<sup>1</sup>, 天野伸治郎<sup>2</sup>, 横川真梨子<sup>2</sup>, Joseph Schressinger<sup>3</sup>, 稲垣冬彦<sup>2</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>東京大院新領域, <sup>2</sup>東京大院工, <sup>3</sup>東京大オープンイノベーションセンター, <sup>4</sup>東京大医科研) ○田代晋也<sup>1</sup>, Jose Martinez Caaveiro<sup>2</sup>, 長門石暁<sup>2,3</sup>, 津本浩平<sup>1,4</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>熊本大院薬, <sup>2</sup>アスピオファーマ, <sup>3</sup>熊本大薬, <sup>4</sup>産総研) ○井川佳之<sup>1,2</sup>, 藤原斉也<sup>3</sup>, 西澤遥<sup>3</sup>, 大浦華代子<sup>3</sup>, 広川貴次<sup>4</sup>, 今井輝子<sup>3</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>北里大薬, <sup>2</sup>昭和大薬) ○小澤新一郎<sup>1</sup>, 合田浩明<sup>2</sup>, 広野修一<sup>1</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>金沢大院医薬保, <sup>2</sup>阪大蛋白研) ○小田彰史<sup>1,2</sup>, 福吉修一<sup>1</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>アクセルリス株式会社, <sup>2</sup>BIOVIA corporate) ○高岡雄司<sup>1</sup>, Dan Berard<sup>2</sup>, Helen Kemmish<sup>2</sup>, Jurgen Koska<sup>2</sup>, Tien Luu<sup>2</sup>, Noj Malcolm<sup>2</sup>, Katalin Nadassy<sup>2</sup>, Jon Sutter<sup>2</sup>, Adrian Stevens<sup>2</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>オープンアイ・ジャパン株式会社, <sup>2</sup>OpenEye Scientific Software Inc.) ○佐藤秀行<sup>1</sup>, Gregory Warren<sup>2</sup>, Paul Hawkins<sup>2</sup>, J Michael Word<sup>2</sup>, Tom Darden<sup>2</sup>, Robert Tolbert<sup>2</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>北里大薬, <sup>2</sup>富山大病院薬) ○中込泉<sup>1</sup>, 加藤敦<sup>2</sup>, 山乙教之<sup>1</sup>, 足立伊左雄<sup>2</sup>, 広野修一<sup>1</sup>
- 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  
(<sup>1</sup>帝人ファーマ, <sup>2</sup>理研) ○熊澤啓子<sup>1</sup>, 佐々木俊太<sup>1</sup>, 幸瞳<sup>2</sup>, 本間光貴<sup>2</sup>