

第 52 回構造活性相関シンポジウム プログラム

(2024年11月25日現在。変更・更新の可能性あります)

主催：日本薬学会構造活性相関部会

協賛学会：情報計算化学生物学会(CBI学会)、日本農薬学会、日本薬学会医薬化学部会、日本薬学会レギュラトリーサイエンス部会、理論化学会、日本バイオインフォマティクス学会

企業協賛： 日本曹達株式会社、サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社、ライフマティックス株式会社（順不同）

企業展示： 株式会社モルシス、インフォコム株式会社、株式会社アフィニティサイエンス、株式会社Elix、株式会社Preferred Networks、株式会社システム計画研究所、株式会社ヒューリンクス（順不同）

広告： 株式会社モルシス、株式会社Elix、三井情報株式会社（順不同）

登録演題数

特別講演1件

基調講演1件

招待講演 3 件

口頭発表（7 件、SAR Award審査対象4件）

ポスター発表（34件、SAR Award審査対象15件）

- ・ポスター展示は1日目12:20から2日目11:40まで（12/12 12:20 – 12/13 11:40の間は掲示したままにしてください。発表者が2日目に参加できない場合は、共著者に撤去を依頼するか、事務局で撤去・処分）

演題番号*はSAR Award候補。

SAR award対象番号（口頭、12/12）

KO02*, KO03*, KO04*, KO05*

SAR award対象番号（ポスター）

KP01*(12/12), KP02*(12/13), KP03*(12/12), KP04*(12/13), KP05*(12/12),

KP06*(12/13), KP07*(12/12), KP08*(12/13), KP09*(12/12), KP10*(12/13),

KP11*(12/12), KP12*(12/13), KP13*(12/12), KP14*(12/13), KP15*(12/12)

Time Table

| 12月12日 (木) | | 12月13日 (金) | |
|-------------|--|-------------|--|
| 9:00 | 開館 | 9:00 | 開館 |
| 9:00-9:15 | 準備 | 9:00-9:10 | 準備 |
| 9:15-10:25 | 受付・クローク (4F) | 9:10-9:35 | 受付・クローク (4F) |
| 10:20-10:30 | 開会 (1F 講演会場) | 9:35-9:55 | ポスター発表 ショートプレゼンテーション (偶数番号17件, 1F講演会場) |
| 10:30-11:10 | 口頭発表 (20分×2件) | 9:55-10:10 | 休憩、4Fポスター会場へ移動 |
| 11:10-11:50 | 口頭発表 (20分×2件) | 10:10-11:40 | ポスター発表(偶数番号、4Fポスター会場) |
| 11:50-13:10 | 昼休憩、ポスター掲示 (12:20までに掲示完了) | 11:40-13:00 | 昼休憩、ポスター撤去 (12:00までに撤去完了) |
| 13:10-14:10 | 口頭発表 (20分×3件) | 13:00-13:40 | 基調講演 (1F講演会場) |
| 14:10-14:20 | 休憩 | 13:40-14:10 | 招待講演 1 |
| 14:20-14:45 | ポスター発表 ショートプレゼンテーション (奇数番号17件, 1F講演会場) | 14:10-14:20 | 休憩 |
| 14:45-15:00 | 休憩、4Fポスター会場へ移動 | 14:20-14:50 | 招待講演2 |
| 15:00-16:30 | ポスター発表 (奇数番号17件, 4Fポスター会場) | 14:50-15:20 | 招待講演3 |
| 16:30-16:45 | 休憩、1F講演会場へ移動 | 15:20-15:30 | 閉会 |
| 16:45-17:30 | 特別講演 (1F講演会場) | 15:30 | 終了、クローク(4F) |
| 17:30 | 1日目終了挨拶 | 15:30-16:30 | 片付け |
| 17:30-17:45 | 懇親会場へ移動 | 17:00 | 閉館 |
| 17:45-19:30 | 懇親会 | | |
| 19:30-20:30 | 片付け | | |
| 21:00 | 閉館 | | |

1日目：12月12日（木）

9:15 開場、参加登録（4F 受付、クローク）

10:20-10:30 開会式（1F 講演会場）
挨拶：古濱彩子実行委員長

10:30-11:10 口頭発表（KO01－KO02、1F講演会場）
座長：川下理日人（近畿大学）

KO01 医薬品特許情報を活用したAIによる分子構造発生手法の開発
○清水祐吾（理研）、大田雅照（理研）、石田祥一（横浜市大院生命医）、寺山慧（横浜市大院生命医）、大澤匡範（慶應大薬）、本間光貴（理研）、池田和由（理研）

KO02* 化学言語モデルによる化合物構造の数値化
○水野忠快（東大薬）、根本駿平（東大薬）、吉開泰裕（東大薬）、菊池陽介（東大薬）、古濱彩子（国衛研）、山田隆志（国衛研）、楠原洋之（東大薬）

11:10-11:50 口頭発表（KO03－KO04、1F講演会場）
座長：池田和由（理研）

KO03* In silico技術を活用したPPI阻害ペプチドの合理的デザイン
○藤田陽（横浜市大生命医科、国立医薬品食品衛生研究所）、出水庸介（横浜市大生命医科、国立医薬品食品衛生研究所）

KO04* 量子化学計算とデータベース解析によるCH/ π およびCH/N相互作用の3次元解析
○早川大地（昭和大院薬）、合田浩明（昭和大院薬）

11:50-13:10 昼休憩、ポスター掲示（12/12 12:20－12/13 11:40掲示必須）

13:10-14:10 口頭発表（KO05－KO07、1F講演会場）
座長：遠藤智史（岐阜大学）

KO05* FMO計算によるタンパク質-低分子化合物のインシリコスクリーニングシステムの開発
○田中蒼大（阪大薬）、福澤薫（阪大院薬）、高谷大輔（阪大院薬）、田雨時（阪大院薬）

- KO06 Toxicity strength prediction of carbamates by momentum-space frontier-orbital based similarity index
○Long Sihan (東北大多元研)、高橋正彦 (東北大多元研)
- KO07 トリインフルエンザヘマグルチニン蛋白質上の局所的な2残基変異による免疫耐性獲得
○前田美紀、西浦颯、熊谷飛鳥、高館佳弘、宮澤光太郎 (農研機構・動衛研)
- 14:10-14:20 休憩
- 14:20-14:45 ポスター発表 ショートプレゼンテーション (各1分、KP01-KP34の奇数番号、1F講演会場)
進行: 植沢芳広 (明治薬大)・川下理日人 (近畿大理工)
- 14:45-15:00 休憩、4F ポスター会場へ移動
- 15:00-16:30 ポスター発表 (KP01-KP34の奇数番号、4F ポスター会場)
- KP01* MD+FMO法を用いた変異型ピロリシルtRNA合成酵素-非天然型アミノ酸における結合性の定量的評価
○大野修 (阪大院薬)、高山真裕 (阪大院薬、塩野義製薬)、田雨時 (阪大院薬)、高谷大輔 (阪大院薬)、坪田知也 (阪大院薬)、山口卓男 (阪大院薬)、中川晋作 (阪大院薬)、樋野展正 (阪大院薬)、福澤薫 (阪大院薬)
- KP03* 分子生成AIによるV-ATPase阻害剤の最適化
戸板太陽 (横浜市大院生命医)、鈴木花野 (千葉大院理、膜タンパク質研究セ)、石田祥一 (横浜市大院生命医)、勝山彬 (北大院薬)、市川聡 (北大院薬)、大田雅照 (理研計算科学研究セ)、池口満徳 (横浜市大院生命医、理研計算科学研究セ)、村田武士 (千葉大院理、膜タンパク質研究セ、横浜市大院生命医)、○寺山慧 (横浜市大院生命医)
- KP05* DPP11阻害剤の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 (北里大薬)、太田裕也 (北里大薬)、田中信忠 (北里大薬)
- KP07* δ オピオイド受容体作動薬KNT-127のキノリン環周辺における構造活性相関研究
○角本智哉 (筑波大院数理物質、筑波大IIS)、徳田明久 (筑波大院人間総合、筑波大IIS)、梶野景太 (筑波大院数理物質、筑波大IIS)、須貝智也 (筑波大

- IIIS)、南雲康行(筑波大IIIS)、広川貴次(筑波大医学医療系、筑波大TMRC)、斉藤毅(筑波大IIIS、筑波大院人間総合、筑波大医学医療系)
- KP09* トランスサイレチン活性予測コンペティション「Tox24 Challenge」の参加報告
○岩下悠馬(明治薬大)、木村恭輔(明治薬大)、駒坂友哉(明治薬大)、宍戸航樹(明治薬大)、中村太一(明治薬大)、朝田瑞穂(明治薬大)、植沢芳広(明治薬大)
- KP11* アルツハイマー病治療薬開発を目指した新規セリンラセマーゼ阻害剤の探索
○大島咲貴(富山大院医薬理工)、東澤知佳(富山大工)、松清優樹(九州工大、名古屋大情報)、坂尻由子(名古屋大情報)、澤田隆介(岡山大医)、柴田友和(九州工大)、岡田卓哉(富山大院医薬理工、富山大工)、森寿(富山大医)、山西芳裕(名古屋大情報)、豊岡尚樹(富山大院医薬理工、富山大工)
- KP13* in silicoスクリーニングを活用したSTINGアンタゴニストの創製
○寺内瞳(岡山大院医歯薬、国立医薬品食品衛生研究所) 戸板太陽(横浜市大院生命医科)、辻巖一郎(国立医薬品食品衛生研究所)、石田祥一(横浜市大院生命医科)、浴本亨(横浜市大院生命医科)、池口満徳(横浜市大院生命医科)、寺山慧(横浜市大院生命医科)、出水庸介(岡山大院医歯薬、国立医薬品食品衛生研究所、横浜市大院生命医科)
- KP15* 細胞膜透過性を考慮したPROTACリンカー生成AIの開発
○村上優貴(横浜市大院生命医)、石田祥一(横浜市大院生命医)、出水庸介(国立衛研、横浜市大院生命医)、寺山慧(横浜市大院生命医)
- KP17 拡散モデルを利用したタンパク質・リガンド複合体構造予測モデルの性能評価
○武本瑞貴(PreferredNetworks)
- KP19 分子動力学法による腫瘍溶解性ウイルスとして有効な麻疹ウイルス変異体の探索
○阪本直人(近畿大院総理研)、川口凜太郎(近畿大理工)、田中成典(神戸大院システム情報学)、福澤薫(阪大院薬)、竹田誠(東大院医)、川下理日人(近畿大理工)
- KP21 分子動力学計算を用いた変異型EGFRの構造解析
○市川裕大(筑波大医学)、工藤玄己(筑波大物理)、吉野龍ノ介(筑波大医学医療系、TMRC)、広川貴次(筑波大医学医療系、TMRC)
- KP23 In silicoアミノ酸マッピング法を応用した自動ペプチド設計プログラムの開発
○山乙教之、星見有香、市村博信、吉田智喜、広野修一、田中信忠(北里大薬)
- KP25 2次元レプリカ交換シミュレーションによる環状ヘキサペプチドの膜透過過

| | |
|-------------|---|
| | 程の解析 |
| KP27 | ○山根努（理研）、大田雅照（理研）、池口満徳（横浜市大院・理研） 「コンピュータ時代」のAI創薬と、「情報時代」のAI創薬の差異に関する 考察 |
| KP29 | ○湯田浩太郎（インシリコデータ） エクソンスキッピングのためのアンチセンス核酸オリゴマーデータベース とスキップ効率予測 |
| KP31 | ○千葉峻太郎（理研計算科学研究セ）、邦武克彦（NCNP遺伝子疾患治療 研究部）、青木吉嗣（NCNP遺伝子疾患治療研究部）、横田俊文（アルバ ータ大医）、奥野恭史（理研計算科学研究セ・京大院医） 電子状態インフォマティクスによる毒性予測：魚類に対する急性毒性予測 モデルの開発 |
| KP33 | ○下釜悠暉（熊本大工）、立石優輔（熊本大院自然科学）、内田悠希（熊 本大院自然科学）、杉本学（熊本大院先端科学・自然科学・産ナノ研、沼 津高専グリーンアンモニア研） 抗がん剤等への応用が期待される新規GLS1阻害剤の創製 |
| | ○山辺果歩（富山大院医薬理工）、岡田卓哉（富山大院医薬理工）、松清 優樹（名大院情報、九州工大）、坂尻由子（名大院情報）、柴田友和（九 州工大）、澤田隆介（岡山大医）、山西芳裕（名大院情報）、森寿（富山 大医）、豊岡尚樹（富山大院医薬理工） |
| 16:30-16:45 | 休憩、1F講演会場に移動 |
| 16:45-17:30 | 特別講演（1F講演会場） |
| 座長： | 本間光貴（理研） |
| KS01 | 特異な相互作用や機能に関わる複雑な電子状態と理論化学的アプローチ 天能精一郎（神戸大） |
| 17:30-17:45 | 1日目終了挨拶、懇親会会場(4F)に移動 |
| 17:45-19:30 | 懇親会 |

2日目：12月13日（金）

- 9:10 開場（1F 講演会場）
- 9:35-9:55 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各1分、KP01-KP34の偶数番号、1F講演会場）
進行：植沢芳広（明治薬大）・川下理日人（近畿大理工）
- 9:55-10:10 休憩、4F ポスター会場へ移動
- 10:10-11:40 ポスター発表(KP01-KP34の偶数番号、4F ポスター会場)
- KP02* 立体構造予測によるHCoVに対するT細胞受容体の交差反応の研究
○菊池碧(横浜市大院生命医)、浴本亨(横浜市大院生命医)、山根努(理研計算科学研究セ)、千葉峻太朗(理研計算科学研究セ)、清水佳奈子(理研生命医科学研究セ)、藤井眞一郎(理研生命医科学研究セ)、池口満徳(横浜市大院生命医、理研計算科学研究セ)
- KP04* リガンド結合に伴う水分子置換を予測する深層学習モデルの開発
○伊藤祐希(東北大院工)、池口満徳(横浜市大院生命医、理研)、大田雅照(理研)、吉留崇(東北大院工)
- KP06* ウイルススーパーファミリー1ヘリカーゼを標的とした19F NMRによるフラグメントスクリーニングと構造活性相関
○中條さくら(東洋大食環境科学)、三島夕佳(立命館大生命科学)、米澤朋起(慶應大薬)、松村浩由(立命館大生命科学)、池田和由(理研計算科学セ)、加藤悦子(東洋大食環境科学)
- KP08* 分子動力学計算に基づく遺伝子多型がCYP2C8の立体構造に与える影響の推定
○仲吉朝希(名城大薬、広島市大院情報)、加藤紘一(湘南医療大薬、名城大薬)、栗本英治(名城大薬)、小田彰史(名城大薬)
- KP10* SMILESの表記揺れ統一化による化学言語モデルへの影響
○菊池陽佑(東大院薬)、吉開泰裕(東大院薬)、古濱彩子(国立医薬品食品衛生研究所)、根本駿平(東大院薬)、楠原洋之(東大院薬)、山田隆志(国立医薬品食品衛生研究所)、水野忠快(東大院薬)
- KP12* 熱帯熱マラリア原虫由来酵素と新規阻害剤との複合体のX線結晶構造解析
○高田紗奈(北里大薬)、Mona A. Abdullaziz (Heinrich Heine University Dusseldorf, Germany (HHU), National Research Center, Egypt (NRC))、Stefan Hufmann (HHU)、Talea Knak (HHU)、阪本泰光(岩手医大薬)、Thomas Kurz (HHU)、田中信忠(北里大薬)

- KP14* インシリコ解析によるType-51 R-bodyのpH依存的な構造変化機構の解明
○大枝弘明（横浜市大）、浴本亨（横浜市大）、山根努（理研）、菊池幸祐（東工大）、伊達弘貴（東工大）、上野隆史（東工大）、池口満徳（横浜市大・理研）
- KP16 熱帯熱マラリア原虫酵素pfDXR阻害剤の探索を目的としたfragment based virtual screening
○中込 泉（北里大薬）、鈴木陽真（北里大薬）、石井美帆（北里大薬）、山乙教之（北里大薬）、田中信忠（北里大薬）
- KP18 MDシミュレーションを用いたpHLAとTCRの相互作用解析
○伊丹すず（近畿大院総研）、有津由樹（熊本大ヒトレトロウイルス学共同研究センター）、北松瑞生（近畿大理工）、本園千尋（熊本大ヒトレトロウイルス学共同研究センター）、川下理日人（近畿大理工）
- KP20 共溶媒分子動力学法を用いたタンパク質-タンパク質相互作用プロファイル
○工藤玄己（筑波大物理）、柳澤溪甫（東京科学大情報理工、MIDL）、吉野龍ノ介（筑波大医学医療系、TMRC）、広川貴次（筑波大医学医療系、TMRC）
- KP22 大規模な結合自由エネルギー計算に基づく化合物デザイン
○田村勇之進、山岸純也（株式会社 Preferred Networks）
- KP24 水和サイト解析を用いたSARS-CoV-2 PLpro阻害剤のバーチャルスクリーニング
○吉田智喜（北里大薬）、吉田真衣（北里大薬）、田中信忠（北里大薬）
- KP26 pH一定の分子動力学シミュレーションに基づくMM/GBSA法による結合自由エネルギー計算：FabI酵素での検証
○藤原伸一（鳥取大医）
- KP28 NGSを用いたラット試験試料からのin vivo変異原性データ取得への取り組み
○伊澤和輝（国衛研安全性生物試験研究セ）、津田雅貴（国衛研安全性生物試験研究セ）、鈴木孝昌（国衛研安全性生物試験研究セ）、本間正充（国衛研総務部）、杉山圭一（国衛研安全性生物試験研究セ）
- KP30 タンパク質-遺伝子モチーフ群の自動抽出システムの開発
○加藤博明（広島商船高専）、松原拓（豊橋技科大）、柚木颯太（広島商船高専）
- KP32 マルチタスク学習を用いたCYP阻害活性予測
○浅野貴春（興和）、伊藤寛倫（興和）、森元俊晴（興和）、神野菜緒子（興和）、佐藤朋広（理研）、本間光貴（理研）
- KP34 乳がん治療薬の開発を指向したDHRS11阻害剤の構造活性相関解析
○遠藤智史（岐阜大院）、宮本悠凜（岐阜薬大）、谷生真敏（岐阜薬大）

大)、平井若菜(富山大院)、中川裕介(富山大院)、坂智文(岐阜薬大)、吉野雄太(岐阜薬大)、岡田卓哉(富山大院)、豊岡尚樹(富山大院)、五十里彰(岐阜薬大)

11:40-13:00 昼休憩、ポスター撤去

ミニシンポジウム「レギュラトリーサイエンスと QSAR」

構造活性相関研究の応用分野のひとつとして、規制の場での構造活性相関の活用の需要が近年高まっていることから、基調講演と招待講演3演題からなるミニシンポジウムを開催いたします。構造活性相関分野と関連分野を結び付け、発展させる場を提供することになれば幸いです。

座長： 古濱彩子(国立衛研)

13:00-13:40 基調講演 (1F 講演会場)

KI01 レギュラトリーサイエンスにおけるAMES/QSARの利用
本間正充(国立医薬品食品衛生研究所)

13:40-14:10 招待講演1

KI02 生態リスク評価におけるQSARの活用

伊丹悠人(国立環境研究所環境リスク・健康領域環境リスク科学研究推進室)

14:10-14:20 休憩

座長： 東田 欣也(株式会社モルシス)

14:20-14:50 招待講演2

KI03 ICH M7ガイドラインに準ずるQSARを活用した医薬品不純物の変異原性予測評価の基礎と実際
小山直己(中外製薬 トランスレーションリサーチ本部 安全性バイオサイエンス研究部)

14:50-15:20 招待講演3

KI04 OECDにおけるQSARの行政利用の推進と日本の貢献
青柳智子(独立行政法人製品評価技術基盤機構)

15:20-15:30 閉会

挨拶：川下理日人第53回シンポジウム実行委員長

・演題番号*はSAR Presentation Award候補です

・口頭発表およびポスター発表の演者に○印が付いています