

第 38 回構造活性相関シンポジウム

日時 平成 22 年 10 月 30 日 (土)・31 日 (日)
会場 徳島大学工学部共通講義棟 (5-6 F) (徳島市南常三島町 2-1)
主催 日本薬学会構造活性相関部会
共催 日本化学会 日本分析化学会 日本農芸化学会 日本農薬学会
懇親会 10 月 30 日 (土)
連絡先 第 38 回構造活性相関シンポジウム事務局
〒105-0014 東京都港区芝 3-17-15 クリエイト三田 207
Tel 03-3798-5240 Fax 03-3798-5251 E-mail sar2010@event-convention.com

第 1 日目 (10 月 30 日)

9:30 - 9:40 開会 中馬寛 (徳島大院・薬)

9:40 - 11:45 SAR Presentation Award 応募講演 (工学部 創成スタジオ)

座長 : 赤松美紀

KA01 分子科学計算に基づくベンゼンスルホンアミド誘導体の炭酸脱水酵素阻害機構解析と
相関解析

○宗井陽平、島本和典、清水美帆、相原薫、山内香子、吉田達貞、中馬寛(徳大院・薬)

KA02 インフルエンザノイラミニダーゼ-シアル酸誘導体複合体相互作用の非経験的フラグ
メント分子軌道法計算に基づく相関解析

○比多岡清司、的場弘、郡恵理、原田政隆、吉田達貞、中馬寛(徳島大院・薬)

KA03 縮環インドール構造を有する新規 Eg5 阻害剤の開発

○竹内智起、大石真也、渡部敏明、大野浩章、浅田直也、北浦和夫(京大院・薬)、澤
田潤一、浅井章良(静岡県大院・薬)、藤井信孝(京大院・薬)

座長 : 藤原巖

KA04 メディシナル・エレクトロノミクス分子としてのオリゴセチレニック芳香族化合物
の疎水性

○小畑勝稔、中田英司、宇都義浩、堀均(徳島大院・STS 研)

KA05 代謝物同定および IN SILICO 予測を用いたヒト代謝酵素 CYP3A4 と CYP2C19 におけ
る基質認識機構の差異

○城谷直紀、十川萌、原田俊幸、宮川恒、平井伸博、赤松美紀(京大院・農)、生城真
一、榊利之(富山県立大・工)

12:40 - 14:40 ポスターセッション (工学部 K407 教室) ※情報化学討論会ポスター会場と共通

12:40 - 13:40 奇数番発表

13:40 - 14:40 偶数番発表

14:40 - 15:30 一般講演 (工学部 創成スタジオ)

座長 : 飯島洋

KO01* 量子化学計算によるタンパク質とリガンドの結合に及ぼす溶媒効果の解析

○浅田直也、北浦和夫(京大院・薬)

KO02* 高活性・高選択性 α_2C Adrenoceptor antagonist の創製とホモロジーモデルを用いた相互

作用解析

○渡辺佳晃、神辺義剛、柏木浩孝、大竹義仁、古田佳之、山口真里奈、與語健二、吉田昌伸、須藤宏和、今川純一、古賀隆樹、大田雅照、森川一実(中外製薬株式会社)

15:30 - 16:25 特別講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：岡島伸之

KS01 Thermodynamic Analysis of Protein-Protein and Protein-Ligand Interactions Provides Rigorous Guidelines for Drug Development
Ernesto Freire(Johns Hopkins University, Department of Biology, USA)

16:35 - 17:30 特別講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：船津公人

JS01 スパコンがもたらす計算化学の革新
平尾公彦(理化学研究所)

17:30 - 18:15 招待講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：大田雅照

KI01 単体及び複合体タンパク質を標的としたインシリコスクリーニング
広川貴次(産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター)

19:00 - 懇親会 (ホテルグランドパレス徳島) ※情報化学討論会と合同

ポスターセッション (工学部 K407 教室)

KP01 PIMTがL-β-AspあるいはD-α-Aspを含むペプチド基質を認識するメカニズムの計算機的研究

○野地郁彦、小林佳奈(東北薬大・薬)、小田彰史(東北薬大・薬、阪大・蛋白研)、高橋央宜(東北薬大・薬)

KP02 CYPの基質および阻害剤選択性に関する統合解析-機械学習, ドッキング, QSAR-

○岡田耕平、山本将博、吉田達貞、中馬寛(徳島大院・薬)

KP03 ヒドロキシルラジカルによるアミノ酸残基のα-水素引き抜きについての密度汎関数計算

○高橋央宜、小林佳奈(東北薬大)、小田彰史(東北薬大、阪大・蛋白研)

KP04 分子内 Redox 反応を利用したフルオロアルケンジペプチドイソスター (FADI) 含有ペプチドの合成と活性評価

○辻耕平、八巻陽子、山本純、重永章(徳島大院・薬)、下東康幸(九州大院・理)、大高章(徳島大院・薬)

KP05 分子モデリング・分子科学計算に基づくヒトノイラミニダーゼの構造-機能解析

○原田政隆、比多岡清司、郡恵理、的場弘、北尾聡、Motiur Md.Rahman, 吉田達貞、辻大輔(徳島大院・薬)、広川貴次(産総研・CBRC)、伊藤孝司、中馬寛(徳島大院・薬)

KP06 非経験的分子軌道法によるフェノール水素原子のラジカル引き抜き反応の分子論的考

察およびフラボノイドの構造活性相関への応用

○廣隅公治、馬島彬、吉田達貞(徳島大院・薬)、志葉優子、河合慶親、寺尾純二(徳島大院・栄養)、中馬寛(徳島大院・薬)

KP07 マウスリゾチームにおけるアスパラギン残基の部位特異的なラセミ化に関する量子化学計算

○小林佳奈(東北薬大)、小田彰史(東北薬大、阪大蛋白研)、高橋央宜(東北薬大)

KP08 ヒト Cathepsin A 活性に対する Arg344 置換の影響に関する実験および分子科学計算に基づく解析

○郡恵理、比多岡清司、原田政隆、的場弘、北尾聡、Motiur Md. Rahman、吉田達貞(徳島大院・薬)、門田佳人(徳島文理大・薬)、辻大輔(徳島大院・薬)、広川貴次(産総研・CBRC)、伊藤孝司、中馬寛(徳島大院・薬)

KP09 S-15176 およびその誘導体がミトコンドリアの膜構造と機能に及ぼす作用

○川島聡(徳島大・薬、徳島大疾患ゲノム研セ)、山本武範(徳島大疾患ゲノム研セ)、堀内優加、藤原健悟(徳島大・薬、徳島大疾患ゲノム研セ)、山下菊治(徳島大院・HBS)、寺田弘(東京理大・薬)、兼松誠(徳島大・薬)、宍戸宏造(徳島大・薬)、篠原康雄(徳島大・薬、徳島大疾患ゲノム研セ)

KP10 D- α -アスパラギン酸および L- β -アスパラギン酸の分子力学計算のためのパラメータの検討

○小田彰史(東北薬大・薬、阪大・蛋白研)、小林佳奈、高橋央宜(東北薬大・薬)

KP11 In silico 創薬技術に基づく D-aspartate oxidase-thiolactomycin 複合体の構造解析

○中込泉、山乙教之、合田浩明、片根真澄、本間浩、広野修一(北里大・薬)

KP12 ICA によるファルマコフォアのクラスタリング

○石川誠(日産化学)

KP13 新規解析手法を用いた QSAR モデルの構築

○本保洋介、岡本晃典(阪大院・薬)、川下理日人(阪大院・薬、阪大微生物病研)、大眉佳大、栗落花昇平、伊藤雅史(阪大院・薬)、高木達也(阪大院・薬、阪大微生物病研)

KP14 非経験的分子軌道法計算に基づく薬物-受容体分子間相互作用における Hammett σ の電子的効果の解析

○清水美帆、馬島彬、吉田達貞、中馬寛(徳島大院・薬)

KP15 結合自由エネルギー計算とランダムフォレストによるプロテインキナーゼ阻害活性の予測

○田村勇之進、宮川博夫(大正製薬)

KP16 1- β -O-アシルグルクロニドの構造活性相関：親電子的分解反応に対するカルボン酸 α 位置換基とキラリティの影響

馬場暁子、○吉岡忠夫(北海道薬大)

- KP17** 化学物質の反復投与毒性試験における神経毒性のデータ解析とカテゴリー化の検討
○西川智、櫻谷祐企、山田隆志、山田隼、前川昭彦、林真(製品評価技術基盤機構)
- KP18** 化学物質の反復投与毒性を対象としたカテゴリーライブラリーの開発
○櫻谷祐企、西川智、山田隆志、山田隼、前川昭彦(NITE)、林真(NITE、安評センター)
- KP19** 副作用情報に基づく薬物性肝障害惹起医薬品の分類と機械学習による安全性予測
○庄野由佳理(徳島大・薬)、足立麻美、坂本久美子(徳島大病院)、佐藤陽一、山内あい子(徳島大院・薬)
- KP20** 毒性予測分野での適用を目指した新規分類/予測手法の提案
○湯田浩太郎((株)インシリコデータ)
- KP21** 化学物質の生物濃縮性における極性官能基の影響
○池永裕、櫻谷祐企、山田隼(NITE・化学物質管理センター)
- KP22** データマイニングによる反復投与毒性データからの基本活性構造(BAS)抽出
大森紀人、○堀川裕志、森幸雄、山川真透、吉岡祐一、川崎万基子、岡田孝(関学大・理工)、林真、櫻谷祐企、阿部武丸、西川智(NITE)、広瀬明彦(国衛研)
- KP23** 自然免疫関連ペプチドと bis-QAC の柔軟性と抗菌能
○大倉一人(千葉科学大学)、篠原康雄(徳島大・薬、徳島大疾患ゲノム研セ)、堀均(徳島大院・STS 研)
- KP24** ベイジアンネットワークによる化学物質の反復投与毒性評価システムの構築
○廣島亮、山口一歩、天木辰哉、岡田孝(関学大・理工)、櫻谷祐企(NITE)
- KP25** 誘導適合を考慮したバーチャルスクリーニングによる新規 HCV NS3-4A プロテアーゼ阻害剤の探索
○高谷大輔、上條加寿恵(理研)、山下篤哉、前川伸哉、雨宮史武、坂本直哉(山梨大院・医)、脇田隆字(国立感染研)、榎本信幸(山梨大院・医)、伊藤正彦(山梨大院・医)、本間光貴(理研)、梅山秀明(理研、北里大学・薬)、松本武久(理研)、横山茂之(理研)
- KP26** アミノ酸残基の周辺環境に注目した GPCR の配列特徴解析システムの開発
○家村享明、加藤博明(豊橋技科大)
- KP27** 遺伝的アルゴリズムによってタンパク質ポケットを重ねあわせる
○菅谷昇義(ファルマデザイン)
- KP28** タンパク質構造予測のための関数とホモロジーモデリングシステムの構築
○荒井まみ(中央大院・理工)、加納和彦、寺師玄記、梅山秀明(北里大・薬)、岩館満雄(中央大・理工)
- KP29** TRNOE 測定、コンピュータリガンドドッキング計算および結合自由エネルギー計算を組み合わせたキチナーゼ B と Argifin 由来ジペプチド阻害剤の相互作用解析
○合田浩明(北里大・薬)、砂塚敏明、廣瀬友靖、井口加奈美、菅原章公、野口吉彦、斉藤佳史、山本剛、塩見和朗、大村智(北里生命科学研)、広野修一(北里大・薬)

- KP30** 多数の drug-like 化合物を用いたコンホメーション発生プログラムの評価
○高木輝文、天野倫子、田中稔祐、富本昌樹(武田薬品工業)
- KP31** 薬物類似構造探索におけるデータ探索手法の比較
○Phan Thieu Van、高橋由雅(豊橋技科大院・工)
- KP32** 肝臓への副作用をおこしやすい特徴的化学構造の抽出
○吉岡祐一、大森紀人、堀川裕志、森幸雄、山川真透、岡田孝(関学大・理工)
- KP33** Gaussian09-SMD 法を用いた LogP 予測
○松本真洋、石川俊夫(石原産業株式会社)

第2日目 (10月31日)

8:30 - 9:20 一般講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：小沢知永

- KO03*** インフルエンザウィルス由来金属酵素 RNA ポリメラーゼを標的とするジケト酸阻害剤の結合様式の予測と分子設計
○石川吉伸、藤井敏(静岡県大・薬)
- KO04*** 原子間相互作用の摂動解析
○小山洋平(理研・CDB)、小林徹也(東大・生研)、上田泰己(理研・CDB)

9:20 - 10:20 特別セッション (工学部 創成スタジオ)

「タンパク質ホモロジーモデリングと構造活性相関の融合」

座長：久保寺英夫

- KF01** 複合体タンパク質モデリングと生物情報学的リガンドドッキングの統合：Integrated-FAMS
梅山秀明(北里大学薬学部)
- KF02** 昆虫脱皮ホルモン受容体とリガンドとの相互作用
中川好秋(京都大学大学院農学研究科)
- KF03** ニコチン性アセチルコリン受容体と殺虫剤ネオニコチノイドとの相互作用
赤松美紀(京都大学大学院農学研究科)

10:30 - 11:15 招待講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：山下富義

- KI02** 薬物の毒性と代謝：基質の構造から酵素の認識を読む
山添 康(東北大学大学院薬学研究科)

11:15 - 12:10 特別講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：藤田稔夫

- KS02** Condensing Chemical Reactions to Pseudo-molecules: An Efficient Way of Reactions Mining
Alexandre Varnek (University of Strasbourg, Laboratory of Chemoinformatics, France)

13:10 - 13:55 招待講演 (工学部 創成スタジオ)

座長：宍戸宏造

- KI03** エピジェネティックに遺伝子発現を制御する低分子化合物の設計と合成

宮田直樹(名古屋市立大学大学院薬学研究科)

13:55 - 14:40 招待講演 (工学部 創成スタジオ)

座長 : 大高章

- KI04** 細胞治療を助ける化合物
上杉志成(京都大学物質-細胞統合システム拠点)

14:55 - 16:15 一般講演 (工学部 創成スタジオ)

座長 : 合田浩明

- KO05*** 自然言語処理による CYP 代謝情報の網羅的収集とそれに基づく構造活性相関解析
○山下富義、吉田秀哉、馮春来、橋田充(京大院・薬)

- KO06** 進化計算を用いた新薬候補構造の骨格デザインに関する研究
○丸野裕史、高橋由雅(豊橋技科大院・工)

座長 : 本間光貴

- KO07** 相互作用プロファイルによるタンパク質複合体予測のポストドッキング解析
○内古閑伸之(東工大院・情理)、広川貴次(産総研・CBRC)、秋山泰(東工大院・情理)

- KO08*** 分子重ね合わせ法を用いた Ligand-Based Drug Design 手法による congeneric な化合物群の 3D-QSAR モデルの構築及びその検証
○土井一生、山乙教之、合田浩明、広野修一(北里大・薬)

16:15 - 16:30 SAR Presentation Award 表彰式 (工学部 創成スタジオ)

閉会

※一般講演 (KO01~08) の*印は A 講演 25 分 (発表 20 分, 質疑 5 分), 無印は B 講演 15 分 (発表 10 分, 質疑 5 分), SAR Presentation Award 応募講演 (KA01~05) は 25 分 (発表 18 分, 質疑 7 分)