

## 第39回構造活性相関シンポジウム

日時 平成23年11月28日(月)・29日(火)

会場 東京理科大学薬学部講義棟(千葉県野田市山崎)

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 11月28日(月)

連絡先 第39回構造活性相関シンポジウム事務局

〒105-0014 東京都港区芝3-2-11-702

Tel 03-3798-5240 Fax 03-3798-5251 E-mail sar2011@event-convention.com

### 第1日目(11月28日)

10:00 - 10:05 **開会** 西谷 潔 (帝京平成大学・薬)

10:05 - 12:40 **SAR Presentation Award応募講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 赤松美紀

KA01 量子計算を用いた高精度結合活性予測モデルの構築: CK2-リガンド複合体

○浅田直也, 北浦和夫(京大院・薬)

KA02 ヒトノイラミニダーゼ-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 (LERE-QSAR)

○比多岡清司、的場弘、原田政隆、河野明大、坂本修平、岡田耕平、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)

KA03 古典QSAR解析における $\sigma_{p+}$ の理論的解釈—密度半関数法分子軌道計算に基づくpara-置換フェノールの水素引き抜き反応に関する解析

○吉田達貞、廣隅公治、原田政隆、比多岡清司、中馬寛(徳島大院・薬)

座長 : 清水良

KA04 キナーゼの大規模ケミカルゲノミクス情報を利用した活性特異的モチーフの抽出と阻害剤活性予測

○新島聡、白石慧、奥野恭史(京大院・薬)

KA05 立体構造の類似性指標とGPCR立体構造データベースの構築

○岩館満雄、松岡美里、荒井まみ(中央大・理工)、加納和彦(国立感染症研)、梅山秀明(中央大・理工)

KA06 United3D: 2つのコンセンサス法によるタンパク質予測構造評価プログラム

○寺師玄記、大澤誠、中村裕樹、加納和彦、竹田一志鷹真由子(北里大・薬)

**13:40 - 15:40 ポスターセッション (薬学部14号館実習室前フロア)**

13:40 - 14:40 奇数番発表

14:40 - 15:40 偶数番発表

**15:50 - 17:20 招待講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 内呂拓実

**KI01** タンパク質間相互作用を標的としたin silico 創薬手法の実践

田沼 靖一(東京理大・薬)

座長 : 宮城島利一

**KI02** ゲノム研究の光と影

宮田 満(日経BP社医療局)

**17:30 - 18:25 特別講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 西谷潔

**KS01** グロバリゼーション - 何をすべきか日本

小林利彦 (東京大学薬友会)

**19:00 - 懇親会 (理科大学カナル会館)**

SAR Presentation Award 表彰式

---

**ポスターセッション (薬学部14号館実習室前フロア)**

**KP01** 硫酸化グリコサミノグリカンは生理的濃度のホルモンFGF19の臓器特異的受容において必要である

○中村真男 (茨大院・理工, 産総研・バイオメディカル), 上原ゆり子, 浅田真弘 (産総研・バイオメディカル), 永井尚子(愛知医大・先端医学医療研究拠点, 愛知医大・分子医科学研), 木全弘治 (愛知医大・先端医学医療研究拠点), 鈴木理 (茨大院・理工, 産総研・バイオメディカル), 今村亨 (産総研・バイオメディカル)

**KP02** 抗腫瘍活性物質Myceliothermophin類およびその安定型類縁体の合成と生物活性

○田中怜, 永田大貴, 山口亮, 塩野崎宣裕 (東京理大・薬), 内呂拓実 (東京理大・薬, 東京理大・戦略的物理製剤学研究セ)

- KP03** 抗マラリア活性物質CodinaeopsinのC17-デメチル型類縁体の合成と生物活性  
○倉科りさ, 山口亮, 塩野崎宣裕 (東京理大・薬), 内呂拓実 (東京理大・薬, 東京理大・戦略的物理製剤学研究セ)
- KP04** PPAR $\gamma$ LBD - 三環系パーシャルアゴニスト複合体構造の構築  
○中込泉 (北里大・薬)、豊岡尚樹 (富山大・工)、峰平大輔、竹田大輔、加藤敦、足立伊左雄 (富山大病院・薬)、松谷裕二 (富山大・薬)、川田耕司、佐藤謙一 ((株) セラバリュース)、山乙教之、合田浩明、広野修一 (北里大・薬)
- KP05** 異性化アスパラギン酸を含むペプチドに対する分子力学計算の妥当性の評価  
○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)
- KP06** 様々な系における自由エネルギー変分原理に基づく相対的な結合自由エネルギーの予測  
○芦田 剛士 (立命大・生命科学・生情), 森田諭貴子 (立命大・生命科学・生情), 菊地武司 (立命大・生命科学・生情)
- KP07** 実験と分子モデリングによる化合物の拡散係数の見積り  
野上佳邦、上田紋華、河合聡人 (崇城大・薬)、田口久貴、赤松隆、新隆志 (崇城大・生)、○宮本秀一 (崇城大・薬)
- KP08** アクティブサンプリングによるデータモデリングと予測の精緻化  
○大山美香、高橋由雅 (豊橋技科大院・工)
- KP09** 一塩基多型による薬物代謝酵素CYP2B6の立体構造への影響  
○小林佳奈 (東北薬大)、小田彰史 (東北薬大、阪大蛋白研)、平塚真弘 (東北大院薬)、山乙教之、広野修一 (北里大・薬)、高橋央宜 (東北薬大)
- KP10** カテゴリーアプローチを用いた化学物質の反復投与毒性評価手法とその評価支援システムの開発  
○櫻谷祐企、山崎和子、張慧琪、西川智、山田隼(NITE)、林真(NITE, 安評センター)
- KP11** 順序カテゴリデータの多変量解析による環境毒性の予測  
○伊藤雅士(阪大院・薬)、山崎広之(北里大・薬)、岡本晃典(阪大院・薬)、川下理日人、高木達也(阪大院・薬, 阪大微生物病研)
- KP12** KY法による皮膚感作性のQSTR解析  
○湯田浩太郎 ((株) インシリコデータ)、Jose M. Ciloy ((株) 富士通九州システムズ)、佐藤一博、日下幸則 (福井大・医)

- KP13** 水素結合性の官能基を持つ物質の生物濃縮性を対象としたカテゴリーアプローチの検討  
○池永裕、櫻谷祐企、山田 隼((独)製品評価技術基盤機構)
- KP14** 部分電荷に基づく毒性予測QSAR式の開発  
○古濱彩子、青木康展、白石寛明((独)国立環境研究所)
- KP15** 分子動力学計算を用いた化合物の代謝部位予測：CYP3A4とcarbamazepineへの適用  
○幸 瞳、本間光貴 (理研SSBC)、畑晶之 (松山大・薬)、星野忠次 (千葉大・薬)
- KP16** 毒性構造知識ベース構築とそのソフトウェア基盤  
○大森紀人、森幸雄、堀川裕志、山川眞透、岡田孝 (関学院大・理工)
- KP17** 血清アルブミン-リガンド相互作用における熱力学パラメータとドッキングエネルギーの相関 - 疎水性リガンドについて  
加藤祐樹、○松浦誠、田浦俊明 (愛知県立大・院情報)
- KP18** アスパラギン酸残基が関与する非酵素的反応とアミド-イミノール互変異性  
○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)
- KP19** 甘味修飾タンパク質の構造と甘味発現機構  
○大久保崇之(新潟薬大・応生)、中嶋健一郎、伊藤啓祐、三坂巧、阿部啓子 (東大院・農)、田宮 実、石黒正路(新潟薬大・応生)
- KP20** 大規模データベースからの基本活性構造(BAS)抽出  
○高田直人、大森紀人、岡田孝(関学大院・理工)
- KP21** 系統樹表現に基づく分子の関係ネットワークの可視化システムの開発  
○檜山綾乃、加藤博明 (豊橋技科大院・工)
- KP22** トポロジカルフラグメントスペクトル (TFS) のフーリエ変換に基づく非冗長な構造記述子  
○志賀元紀、高橋由雅(豊橋技科大院・工)
- KP23** 既知活性化合物との網羅的3D構造比較に基づく新規バーチャルスクリーニング手法の開発  
○佐藤朋広、本間光貴 (理研)
- KP24** 分子行列の固有値にもとづく構造プロファイリング  
○宮脇康司、高橋由雅 (豊橋技科大院・工)
-

**第2日目 (11月29日)**

**9:45 - 10:50 一般講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 岡島伸之

- K001\*** ベニバナ花卉中に含まれる生理活性物質の構造と活性  
○熊沢智、田中利一 ( (株) SK 農業戦略研究所)、松葉滋 (山形大・工)
- K002\*** In silico代謝安定性予測モデルを用いた創薬スクリーニング手法の開発  
○綾部美帆、長谷川清、妹尾千明、荒井真一、大田雅照 (中外製薬 (株) )
- K003** 生体内分子の三次元構造データベースの開発とVersion 2.1の公開  
○前田美紀 ((独) 生物研)

**11:00 - 11:45 招待講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 山下富義

- KI03** 安全性 (毒性) 評価のための予測に関する研究の現状  
赤堀 有美 ((一財) 化学物質評価研究機構 (CERI))

座長 : 赤松美紀

- 12:45 - 13:00** Corwin Hansch 先生を偲ぶ  
藤田稔夫 (日本薬学会構造活性相関部会)

**13:00 - 14:30 招待講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 中山 章

- KI04** ミトコンドリア電子伝達酵素複合体-Iに作用する阻害剤の作用機構  
三芳秀人 (京大院・農)

座長 : 粕谷 敦

- KI05** 多剤排出トランスポーターの結晶構造に基づく動的機能解析  
村上 聡 (東工大院・生命理工)

**14:40 - 15:20 一般講演 (薬学部 1311教室)**

座長 : 高木達也

- K004\*** Why does tamiflu have a branched alkoxy side chain?  
○比多岡清司、的場弘、原田政隆、河野明大、坂本修平、岡田耕平、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)
- K005** 分子進化計算: 初期個体集合生成アルゴリズムの改良  
○丸野裕史、高橋由雅 (豊橋技科大院・工)

## 閉会

※一般講演（K001～05）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（KA01～06）は25 分（発表18 分，質疑7 分）