

第 49 回構造活性相関シンポジウム

概要

日時：2021 年 11 月 18 日（木）・19 日（金）

会場：オンライン開催

主催：日本薬学会構造活性相関部会

協賛：情報計算化学生物学会(CBI 学会)、日本化学会、日本農薬学会

後援：日本農芸化学会

企業協賛：株式会社 Elix、日本曹達株式会社、ブルカー・ジャパン株式会社

企業展示：株式会社 Elix、オープンアイ・ジャパン株式会社、株式会社モルシス
(各 50 音順)

プログラム

第 1 日目 11 月 18 日（木）

9:00-9:30 Zoom Webinar/ Remo Conference 開場

Zoom Webinar

9:30-9:40 開会式

9:40-10:30 招待講演

座長：永田尚也（大日本住友製薬）

座長補佐：選定中

KI-01 モダリティの多様化における創薬化学と計算化学の連携
今枝泰宏（株式会社 Epigeneron 研究開発部長）

10:30-10:40 休憩

10:40-11:40 口頭発表 (K0-01 ~ K0-03)

座長：赤木辰央（日本たばこ産業）

座長補佐：選定中

KO-01 DNA メチル化制御薬の開発：維持メチル化因子 UHRF1 の機能阻害剤のリード化合物の同定

○郡聡実¹、柴橋佑希¹、浴本亨¹、西山敦哉²、吉見早恵¹、長門石暁²、大田雅照³、津本浩平²、中西真²、池口満徳^{1,2}、有田恭平¹（¹横浜市大・生命医、²東京大・医科研、³理研）

KO-02 電子顕微鏡データと三次元深層学習によるタンパク質構造モデルの評価

○寺師玄記¹、Xiao Wang²、Sai Raghavendra Maddhuri Venkata Subramaniya²、John J. G. Tesmer¹、木原大亮^{1,2}（¹Purdue 大・生物、²Purdue 大・計算）

KO-03 タンパク質立体構造情報に基づくヒト免疫不全ウイルスの薬剤耐性の予測

○太田亮作、宗可奈子、津田真弘、樋口ゆり子、山下富義（京大院・薬）

11:40-11:50 ランチョンセミナー内容説明

11:50-11:55 Remo Conference 利用説明

11:55-12:00 休憩

Remo Conference

座長：仲西功（近畿大学）

永田尚也（大日本住友製薬）

12:00-13:00 ランチョンセミナー(1日目)

12:00-12:30 株式会社モルシス

12:30-13:00 株式会社エクサウィザーズ

13:00-13:30 企業展示

13:30-14:00 ポスターショートプレゼン(1日目 KP-01 ~ KP-19)

14:00-15:30 ポスター発表(1日目 KP-01 ~ KP-19)

Zoom Webinar

15:30-16:30 口頭発表 (KO-04 ~ KO-06)

座長：中村真也 (近畿大学)

座長補佐：選定中

KO-04 SARS-CoV-2 メインプロテアーゼと既存薬の FMO 動的相互作用解析

○半田佑磨¹、川嶋裕介¹、畑田峻²、奥脇弘次²、望月祐志²、古石誉之¹、米持悦生¹、本間光貴³、古明地勇人⁴、田中成典⁵、福澤薫^{1,6} (1星薬大、2立教大・理、³理研、⁴産総研、⁵神戸大院シス情、⁶東北大院・工)

KO-05 遺伝子発現プロファイルから医薬候補化合物を設計する構造生成器

○海東和麻、山西芳裕 (九工大院・情報工)

KO-06 電荷分布を明示的に記述する分子モデル構築のための電子密度フィッティング法

○早川大地、渡邊友里江、合田浩明 (昭和大・薬)

Remo Conference

16:30-18:00 懇親会

第2日目 11月19日 (金)

9:30 Zoom Webinar/ Remo Conference 開場

Zoom Webinar

10:00-10:50 招待講演

座長：仲西功 (近畿大学)

座長補佐：選定中

KI-02 SACLA におけるタンパク質 X 線結晶構造解析の現状

中津亨 (和歌山県立医科大学薬学部 教授)

10:50-11:00 休憩

11:00-11:40 口頭発表 (K0-07 ~ K0-08)

座長：西脇敬二 (近畿大学)

座長補佐：選定中

KO-07 PDHK ATP サイトに対する **Fragment Screening** での新規ケモタイプ取得

○赤木辰央¹、別所祐紀¹、伊東敬史¹、藤岡真悟¹、生方実¹、森元気¹、山中健司¹、折田匠哉¹、土井郷樹¹、古園朋子¹、池頭和孝¹、判谷吉嗣¹、仲西功²、安達剛¹ (1日本たばこ産業、²近畿大・薬)

KO-08 AlphaFold2 より得られたヒト全タンパク質立体構造に基づくドッキングシミュレーションと薬効予測

○坂尻由子、柴田友和、澤田隆介、山西芳裕 (九工大院・情報工)

11:40-11:50 ランチョンセミナー内容説明

11:50-11:55 Remo Conference 利用説明

11:55-12:00 休憩

Remo Conference

座長：中村真也 (近畿大学)

赤木辰央 (日本たばこ産業)

12:00-13:00 ランチョンセミナー(2日目)

12:00-12:30 オープンアイ・ジャパン株式会社

12:30-13:00 シュレーディングガー株式会社

13:00-14:00 企業展示

14:00-14:20 ポスターショートプレゼン(2日目 KP-20 ~ KP-32)

14:20-15:50 ポスター発表(2日目 KP-20 ~ KP-32)

Zoom Webinar

15:50-16:40 特別講演

座長：大田雅照 (理化学研究所)

座長補佐：選定中

KS-01 計量薬学の歴史と未来

高木達也 (大阪大学大学院薬学研究科 教授)

16:40-17:00 SAR Award 表彰式・閉会式

ポスター

1 日目 11/18 14:00~15:30

- KP-01 CK2a1 選択性向上に向けたニトリル系化合物複合体の構造知見
○池田朝香¹、露口正人¹、中村真也²、西脇敬二²、仲西功²、木下誉富¹ (1 大阪府大院・理、² 近畿大・薬)
- KP-02 インシリコスクリーニングから得た ERK2 アロステリック阻害剤の選択性に関する考察
○吉田茉由¹、杉山肇²、永尾春菜³、澤匡明³、木下誉富¹ (1 大阪府大院・理、² 三菱ケミカル、³ カルナバイオサイエンス)
- KP-03 分子動力学計算によるシアノバクテリア *Anabaena* PCC7119 フェレドキシンの溶液構造予測
○仲吉朝希^{1,2}、鷹野優^{1,3} (1 広島市大院・情報、² 名城大・薬、³ 阪大・蛋白研)
- KP-04 Asn 残基の脱アミド化および C 末端側ペプチド結合切断における C 末端側 Pro 残基の影響
○加藤紘一^{1,2,3}、仲吉朝希^{2,4}、石川由伸¹、栗本英治²、小田彰史^{2,5} (1 湘南医療大・薬、² 名城大・薬、³ 金城学院大・薬、⁴ 広島市大院・情報、⁵ 阪大・蛋白研)
- KP-05 中分子シクロスポリン A とシクロスポリン E の分子ダイナミクスの比較
○伊藤朱里¹、浴本亨¹、山根努²、池口満徳^{1,2} (1 横浜市大・生命医、² 理研・R-CCS)
- KP-06 Effect of Water Molecules on the Activating S810L Mutation of the Mineralocorticoid Receptor
○武富啓^{1,2}、大田雅照³、浴本亨¹、池口満徳^{1,3} (1 横浜市大・生命医、² 田辺三菱製薬、³ 理研)
- KP-07 環状人工イオンチャネルの相互作用解析
○中川真由子¹、山根努²、浴本亨¹、佐藤浩平³、金原数³、池口満徳^{1,2} (1 横浜市大・生命医、² 理研・R-CCS、³ 東工大院・生命理工)
- KP-08 フラグメント分子軌道法と分子動力学シミュレーションによる AKR1B10 複合体の相互作用解析
○吉本耀¹、川下理日人² (1 近畿大・総合理工、² 近畿大・理工)

- KP-09 フラグメント分子軌道法を用いた SARS-CoV M^{pro} と阻害剤の相互作用解析
○西條航、川下理日人 (近畿大・理工)
- KP-10 インフルエンザウイルス RNA ポリメラーゼのサブユニット間相互作用阻害剤の
バーチャルスクリーニング
○大岩瑞季¹、小澤新一郎^{1,2}、田中信忠^{1,2} (1北里大院・薬、²北里大・薬)
- KP-11 *In silico* フラグメントマッピング法を用いた新規 ATAD2 阻害剤の探索
○越智拓仁¹、吉田智喜^{1,2}、田中信忠^{1,2} (1北里大院・薬、²北里大・薬)
- KP-12 全原子分子動力学シミュレーションを使ったヒト L 型アミノ酸トランスポーター
LAT1 のコンフォメーション変化の解析
○吉田夏海¹、浴本亨¹、山根努²、池口満徳^{1,2} (1横浜市大院・生命医、²理研・
R-CCS)
- KP-13 (2日目へ変更)
- KP-14 Dscore に基づく多目的最適化による ChemTS を用いた選択的阻害剤の設計
○吉澤竜哉¹、石田祥一²、佐藤朋広²、寺山慧^{1,2} (1横浜市大・国際総、²横浜市
大・生命医)
- KP-15 維持メチル化因子 UHRF1 の阻害剤探索：MD を組み合わせたインシリコ
スクリーニング
○柴橋佑希¹、浴本亨¹、郡聡実¹、山根努²、有田恭平¹、池口満徳^{1,2} (1横浜市
大・生命医、²理研・R-CCS)
- KP-16 TS-MD による Interleukin-2-inducible T-cell kinase 活性化機構の解明
○中居雪菜¹、浴本亨²、山根努³、小川直樹²、寺山慧²、池口満徳^{2,3} (1横浜市
大・国際総、²横浜市大・生命医、³理研・R-CCS)
- KP-17 FMO 法を用いた JAK2 とイミダゾピロピリジン系化合物の結合性および
選択性評価
○堺大輔¹、半田佑磨¹、平井優樹¹、奥脇弘次¹、古石誉之¹、米持悦生¹、沖山
佳生²、田中成典³、福澤薫^{1,4} (1星薬大、²国立衛研、³神戸大院・シス情、⁴東北
大院・工)
- KP-18 2 量体の Template-Based Docking における テンプレート検索手法の比較検証
○小林慎平、清田泰臣、原田祥季、竹田一志鷹真由子 (北里大・薬)

KP-19 転移学習を用いた活性予測モデルの新規化合物シリーズに対するモデル適用性の改善

○佐藤朋広¹、寺山慧¹、本間光貴² (1横浜市大・生命医、²理研)

2日目 11/19 14:20~15:50

KP-13 COMT と阻害剤の相互作用における官能基の寄与の FMO 法による評価

○白井智子¹、山本亜美¹、古石誉之¹、米持悦生¹、武部克希²、鶴澤成一²、飯島洋³、福澤薫¹ (1星薬大・薬、²大阪大・歯、³日本大・薬)

KP-20 選択的 Cav3.2 T 型 Ca チャネル阻害薬を目指したピモジドの最適化研究

○石川千浩¹、長南百香²、木野貴博³、笠波嘉人³、高島康宏³、岡田卓哉^{1,2}、関口富美子³、吉田繁⁴、大久保つや子⁵、川畑篤史³、豊岡尚樹^{1,2} (1富山大院・理工、²富山大・工、³近畿大・薬、⁴近畿大・理工、⁵福岡看護大)

KP-21 酵素生成物阻害の反応速度論解析：賦活化物質による生成物阻害の解除機構の解明

○飯島洋、丹羽典朗 (日本大・薬)

KP-22 Database AutoPH4: 複数のタンパク質立体構造を用いたファーマコフォアとポケット解析

○木村嘉朗¹、Chris William² (1モルシス、²Chemical Computing Group)

KP-23 フラグメント分子軌道法を用いた SARS-CoV-2 と抗体の相互作用解析

○相坂奈々美、川下理日人 (近畿大・理工)

KP-24 フラグメント分子軌道法による Menin-阻害剤の相互作用解析

○時松和佳菜、川下理日人 (近畿大・理工)

KP-25 タンパク質-タンパク質阻害剤、膜透過性予測モデルを用いたライブラリーデザイン

○米澤朋起¹、池田和由^{1,2}、大澤匡範¹、大田雅照²、本間光貴² (1慶應大・薬、²理研)

KP-26 タンパク質-フラグメント複合体 X 線構造に基づく *in silico* フラグメント・マッピング法

○山乙教之、広野修一、田中信忠 (北里大・薬)

- KP-27 ニューロトロフィン受容体 TrkAd5 結合ペプチドのデザイン
○高橋真帆¹、浴本亨²、鈴木里佳¹、山根努²、高橋栄夫¹、池口満徳^{1,2} (1横浜市大・生命医、²理研・R-CCS)
- KP-28 VISCANA による SARS-CoV-2 main protease とリガンドの網羅的相互作用解析
○大山達也¹、渡邊千鶴^{2,3}、神坂紀久子²、高谷大輔²、福澤薫⁴、本間光貴² (1甲南大・FIBER、²理研、³JST さきがけ、⁴星薬大)
- KP-29 電子状態インフォマティクスによる TYK2 阻害活性分子の活性要因解析
○中村登志¹、大川和史¹、杉本学^{1,2} (1熊本大院・自然科学、²熊本大院・先端科学)
- KP-30 キュレート Single cell RNA-seq データの統合と横断解析事例の紹介
○清良尚史¹、Frank Staubli²、Jana Sponarova²、Pavel Honsa²、Jean-Marie Droz²、Stefan Bleuler²、Philip Zimmermann² (1モルシス、²Nebion)
- KP-31 分子行列の固有ベクトルにおける分子グラフのサイズ依存性とその回避について
○若栗佳介^{1,2}、高橋由雅³、金谷重彦¹ (1奈良先端大、²新潟薬大・応、³豊橋技科大院・工)
- KP-32 新規 DeepSnap-Deep Learning を基にした構造活性相関システムを用いた毒性発現経路の分子開始反応に対するアゴニストおよびアンタゴニスト予測モデル
○松坂恭成^{1,3}、十時伸²、半田健太郎²、塩田哲義²、黒崎宏太¹、植沢芳広¹ (1明治薬大、²富士通、³東京大・医科研)