

第 53 回構造活性相関シンポジウム プログラム

1 日目：9 月 4 日（木）

- 9:30 開場
- 10:20-10:30 開会挨拶
- 10:30-11:10 口頭発表（KO01、KO02）
- KO01 特許情報を活用した医薬品らしさAIの開発
○清水祐吾（理研）、幸瞳（理研）、大田雅照（理研）、本間光貴（理研）、池田和由（理研）
- KO02 ファーマコフォア条件に基づく拡散モデルによる3次元分子生成手法の開発
○酒向正己（東京科学大情報理工）、安尾信明（東京科学大物質理工）、関嶋政和（東京科学大情報理工）
- 11:10-11:40 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各 1 分、KP1-01～1-18）
- 11:40-13:00 昼休憩、ポスター掲示（掲示時間：1日目11:40から2日目15:10）
- 13:00-14:30 ポスター発表
- KP1-01 ウイルスSF1ヘリカーゼ標的型の抗ウイルス薬創出に向けたスクリーニングと活性評価
○中條さくら（東洋大院食）、赤羽根健生（理研R-CCS）、米澤朋起（慶應大薬）、松村浩由（立命館大生）、池田和由（理研R-CCS）、加藤悦子（東洋大院食）
- KP1-02 キヌレニンアミノトランスフェラーゼ2と阻害剤との複合体の立体構造推定
○大城寧音（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬、名大高等研）、栗本英治（名城大薬）、藤垣英嗣（藤田医大保健）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬）
- KP1-03 酵素protein L-isoaspartyl/D-aspartyl O-methyltransferaseによる基質認識機構の解析
○仲吉朝希（名城大薬、名大高等研、広島市大院情報）、水野文人（名城大薬）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、鷹野優（広島市大院情報）、小田彰史（名城大薬）

- KP1-04 選択的かつ強力なラムノシダーゼ阻害活性を示すswainsonine誘導体の合成
○笠松直人（富山大院医薬理工）、岡田卓哉（富山大院医薬理工）、川崎正志（富山県大）、加藤敦（富山大病院）、豊岡尚樹（富山大院医薬理工）
- KP1-05 Ser26のD-化およびGlu3の環化がアミロイドβの立体構造に与える影響の推定
○峯岸昂生（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬・名大高等研）、栗本英治（名城大薬）、加藤紘一（名城大薬・湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬・阪大蛋白研）
- KP1-06 プリン骨格を有するProtein Kinase CK2阻害剤の構造活性相関研究
○西脇敬二（近畿大薬）、中谷汐里（近畿大薬）、中川愛理（近畿大薬）、吉岡賢司（近畿大薬）、中村真也（近畿大薬）、露口正人（阪公大院理）、木下誉富（阪公大院理）、仲西功（近畿大薬）
- KP1-07 STINGの構造対称性に基づく新規阻害剤の設計と構造展開
○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）、小沼剛（横浜市大院生命医科）、原英樹（旭川医大）、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）
- KP1-08 高選択性阻害剤創出を目指したMAP2K-スタウロsporin複合体の相互作用解析
○北野真有（阪公大院理）、祐村清悟（阪公大院理）、御幡瑠璃（阪大院薬）、馬場健吉（阪公大院理）、澤 匡明（カルナバイオサイエンス）、田中成典（神戸大分子フォトサイエンス研究センター）、福澤薫（阪大院薬）、木下誉富（阪公大院理）
- KP1-09 2次元レプリカ交換分子動力学シミュレーションgREST/REUS法による環状ペプチドの膜透過過程の解析
○山根努（理研）、大田雅照（LINC、理研）、池口満徳（横浜市大院、理研）
- KP1-10 ウシ膵臓リボヌクレアーゼAのドメインスワッピングにアスパラギン残基の脱アミド化が与える影響の分子動力学シミュレーションによる推定
○古賀朱莉（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬、名大高等研）、栗本英治（名城大薬）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬）
- KP1-11 酵素非存在下でのペプチド結合形成反応の量子化学計算

- 水野文人（名城大院薬）、仲吉朝希（名城大院薬、名大高等研）、加藤紘一（名城大院薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大院薬）
- KP1-12 ペプチドが複数集まってできた原始タンパク質候補の分子動力学シミュレーションによる構造推定
- 重原龍至（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬、名大高等研）、栗本英治（名城大薬）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬、阪大蛋白研）
- KP1-13 コンセンサススコアリングによる標的タンパク質と相互作用するペプチドの選択
- 山乙教之、作山智哉、太田咲良、須藤帆乃香、村田将、田中信忠（北里大薬）
- KP1-14 機械学習を用いたゴナドトロピン放出ホルモン受容体のアゴニスト活性予測
- 三倉唯（明治薬大、大塚製薬）、植沢芳広（明治薬大）
- KP1-15 分子動力学シミュレーションを用いた野生型及び変異型ジヒドロピリミジンナーゼ2量体の立体構造解析
- 高橋大輝（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬、名大高等研）、菱沼英史（東北大未来型医療創成センター）、平塚真弘（東北大未来型医療創成センター、東北大院薬）、栗本英治（名城大薬）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬）
- KP1-16 AI創薬に向けた段階的開発導入の提案
- 湯田浩太郎（（株）インシリコデータ）
- KP1-17 CYP2C19の基質認識時の構造変化と基質の結合様式の推定
- 風見美薫（名城大薬）、水野文人（名城大薬）、仲吉朝希（名城大薬、名大高等研）、栗本英治（名城大薬）、菱沼英史（東北大未来型医療創成センター）、平塚真弘（東北大未来型医療創成センター、東北大院薬）、加藤紘一（名城大薬、湘南医療大薬）、小田彰史（名城大薬）
- KP1-18 AIを活用した農薬の環境生物毒性予測モデルの開発と検証
- 池田和由（理研）、○赤羽根健生（理研）、米澤朋起（慶應大、ライフマテイクス）、清水祐吾（理研）、近藤圭（残農研）、小林由幸（星薬科大）、小川真弘（クミアイ化学）、竹田至（クミアイ化学）、北本隼也（クミアイ化学）、岩佐万実（日産化学）、星川優美子（日産化学）、飯野翔平（日本曹達）、松本建（日本曹達）、泰永涼子（日本農薬）、久間達彦（日本農薬）、大竹潤（日本農薬）、金岡怜志（三井化学CLS）、番場伸一（三井化学CLS）、新延弘章（三井化学CLS）、上島仁（ISP）、福島勇二（残農研）、大田雅照（理研）、本間光貴（理研）

- 14:30-14:40 休憩
- 14:40-15:40 特別講演
KS01 構造生物学を基盤としたキナーゼ創薬研究
木下誉富（大阪公立大）
- 15:40-15:50 休憩
- 15:50-16:30 口頭発表（KO03、KO04）
KO03 エビネ由来天然物calanthosideを基盤とした構造活性相関研究
○高島克輝（近畿大薬）、鈴木璃子（近畿大薬）、萬瀬貴昭（富山大和漢研）、石川文洋（近畿大薬）、森川敏生（近畿大薬総研）、田邊元三（近畿大薬、近畿大薬総研）
KO04 加水分解型モノアシルグリセロールリパーゼリガンドの分子動力学シミュレーション研究
○大久保崇之（量研機構量医研、住重加速器サ）、山崎友照（量研機構量医研）、森若菜（量研機構量医研）、張一鼎（量研機構量医研）、栗原雄祐（量研機構量医研、住重加速器サ）、小川政直（量研機構量医研、住重加速器サ）、念垣信樹（量研機構量医研、住重加速器サ）、河村和紀（量研機構量医研）、張明栄（量研機構量医研）
- 16:30-16:40 休憩
- 16:40-17:40 特別講演
KS02 胃プロトンポンプの構造情報と AI によって駆動された新規阻害剤の de novo デザイン
阿部一啓（北海道大学）
- 17:40-18:00 1日目終了挨拶、懇親会会場に移動
- 18:00-20:00 懇親会（The Lounge）

2日目：9月5日（金）

- 9:00 開場
- 9:30-10:10 口頭発表（KO05、KO06）
- KO05 質量分析を活用した蛋白質間相互作用を制御する低分子リガンドの機能解析
○長門石暁（東大院工）、津本浩平（東大院工）
- KO06 Quantitative Structure–Activity Relationships for Human Galectin-3 Inhibitors: Insights from Quantum Chemical Interaction Energy Terms
○増田友秀（横浜市大）、渡邊千鶴（理研）、加藤幸一郎（九大）、本間光貴（理研）、大田雅照（理研）、池口満徳（横浜市大）
- 10:10-11:10 特別講演
- KS03 電子線三次元結晶構造解析とクライオ EM による化学特性の計測
米倉 功治（理化学研究所）
- 11:10-11:40 ポスター発表 ショートプレゼンテーション（各1分、KP2-01～2-17）
- 11:40-13:30 昼休憩
- 13:30-15:00 ポスター発表
- KP2-01 AlphaFold3によるType-51 R-bodyの構造変化機構の解明
○大枝弘明（横浜市立生命医）、浴本亨（横浜市立生命医）、山根努（RIKEN R-CCS）、菊池幸祐（東京科学大生命理工）、伊達弘貴（東京科学大生命理工）、上野隆史（東京科学大生命理工）、池口満徳（横浜市立生命医、RIKEN R-CCS）
- KP2-02 CYP3A4阻害作用におけるアゾール部位の構造活性相関
○河合健太郎、干川翔貴、軽尾友紀子、樽井 敦、佐藤和之、表雅章、片岡誠（摂南大薬）
- KP2-03 AIを用いた結合ポーズ予測精度向上のための新規記述子LCP2の開発
○干川翔貴、楠本晴菜、軽尾友紀子、樽井敦、佐藤和之、表雅章、河合健太郎（摂南大薬）
- KP2-04 活性予測モデルを用いた分子生成AIによるV-ATPase阻害剤の最適化戦略
○戸板太陽（横浜市大院・生命医）、鈴木花野（千葉大院・理、量子生命

構造創薬セ), 石田祥一 (横浜市大院・生命医), 山崎奏空 (北大院・薬), 勝山彬 (北大院・薬), 市川聡 (北大院・薬), 大田雅照 (理研・計算科学セ), 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, 量子生命構造創薬セ, 横浜市大院・生命医), 寺山慧 (横浜市大院・生命医)

- KP2-05 Keap1環状ペプチド阻害剤の探索を指向した機械学習モデルの構築
○小平知樹 (近畿大理工)、藤川あかり (近畿大理工)、川下理日人 (近畿大理工)
- KP2-06 Negative Fragmentation Approachによる生体分子間・分子内相互作用の定量的評価法
○鷹野優 (広市大院情)・兼松佑典 (広大院先進理工)・小田雄一郎 (広市大院情)・近藤寛子 (北見工大工)・中村春木 (阪大蛋白研)
- KP2-07 AlphaFold3と分子ドッキングを活用したRseP阻害剤のスクリーニングと基質選別機構の解析
○高橋怜見衣(横浜市大院生命医)、大枝弘明(横浜市大院生命医)、井上雅郎(横浜市大院生命医)、浴本亨(横浜市大院生命医)、山根努(理研計算科学セ)、檜作洋平(京大医生物学研究所)、禾晃和(横浜市大院生命医)、秋山芳展(京大医生物学研究所)、池口満徳(横浜市大院生命医・理研計算科学セ)
- KP2-08 Evaluating RBFEP Performance with NNP-Driven Custom Force Field Parameters
○山岸純也 (Preferred Networks)、田村勇之進 (Preferred Networks)、本木大資 (Preferred Networks)
- KP2-09 in silico香料スクリーニング評価法検討に関する遺伝毒性データ解析
○古濱彩子、亀山暁子、本間正充、杉山圭一(国立衛研)
- KP2-10 拡散モデルに基づく活性予測を用いた分子生成の高速化に向けた検討
○吉澤竜哉 (横浜市大院生命医・理研IMS)、佐藤朋広 (理研IMS)、大田雅照 (LINC)、本間光貴 (理研IMS)、寺山慧 (横浜市大院生命医・東京科学大MDXES・理研AIP)
- KP2-11 π/π , CH/ π , およびhalogen/ π 相互作用の量子化学計算とデータベースに基づいた3次元解析
○早川大地(昭和医大薬)、合田浩明(昭和医大薬)
- KP2-12 構造情報に基づくリード化合物自動提案ツールとそのGUI実装
○工藤玄己 (筑波大物理)、平尾巧 (筑波大医学医療系)、吉野龍ノ介 (筑波大医学医療系、TMRC)、重田育照 (筑波大CCS)、広川貴次 (筑波大医学医療系、TMRC)

- KP2-13 データ不均衡補正によるPPI阻害活性予測モデルの精度向上
○隋芸煊（慶應大）、清水祐吾（理研）、大澤匡範（慶應大）、池田和由（理研・慶應大）
- KP2-14 全長ノイラミニダーゼの動的挙動の解析
○祐村清悟（農研機構）、前田美紀（農研機構）
- KP2-15 AlphaFold-Multimerによる予測構造を用いたタンパク質複合体結合親和性計算の精度検証
小保方瑠奈（北里大薬）、○清田泰臣（北里大薬）、竹田一志鷹真由子（北里大薬）
- KP2-16 PPI調節化合物の作用機序解析に向けたAI基盤構築
○永江翼（横浜市大院生命医科・産総研）、宗田光平（東京大院新領域・産総研）、池田和由（理研）、椿真史（産総研）、富井健太郎（産総研・横浜市大院生命医科・東京大院新領域）
- KP2-17 機械学習を用いた浮動性めまいを誘発する抗がん薬の構造活性相関解析
○位田佳唯斗、岩下悠馬、植沢芳広（明治薬大）
- 15:00-15:10 休憩
- 15:10-16:10 特別講演
KS04 AlphaFold がもたらす計算創薬の変革
大上 雅史（東京科学大学）
- 16:10-16:20 次回開催案内、閉会挨拶
次回開催案内：前田美紀（第54回シンポジウム実行委員長）
閉会挨拶：川下理日人（第53回シンポジウム実行委員長）