



CBI 学会誌



第 1 卷第 2 号

2013 年 10 月 31 日発行

CBI 学会誌

第1卷 第2号

2013年10月31日発行

CBI 学会

目次

(1) CBI ジャーナル投稿分野再編 新分野紹介	1
(2) 各種委員会報告	4
(3) 講演会報告・予告	6

分野再編

CBI ジャーナル投稿分野

新分野 紹介

CBI ジャーナルの投稿分野が 2013 年度、再編されました。CBI ジャーナル編集委員会各分野長に新分野のご紹介をお願いしました。

第一分野

分子認識と分子計算 (Molecular recognition and molecular modeling)

第一分野分野長 長崎大学 医歯薬学総合研究科 石川 岳志

生体分子の認識を司る分子間相互作用とその理論的予測方法に関する研究

<Keywords:> 電子状態計算, 第一原理計算, 分子軌道法, 密度汎関数法, 電子相関, フラグメント分子軌道法, 励起状態, 分子動力学法, モンテカルロ法, 分子力化学法, リガンド・ドッキング, 結合自由エネルギー, タンパク質と低分子との相互作用, 蛋白質のモデリング, 酵素反応, 生体微量金属, 分子ナノ表面相互作用解析, 分子モデリング

様々なコンピューター・シミュレーションを駆使し、複雑な生命現象を原子・電子レベルで理解することは、本誌刊行の大きな目標の一つである。なかでも、分子科学シミュレーションは、近年のコンピューターの発達と相まって、その適用範囲を生物学、薬学、医学といった生命科学分野へと大きく広げてきた。そして、量子化学計算、分子動力学計算、粗視化計算といった各階層の計算手法は、それぞれの利点を活かし、また相補に結びつくことによって、その重要性をますます高めている。本誌第一分野は、主に、これらの分子科学シミュレーションを用いた、生命科学に関連する研究を対象とする。具体的には、結合自由エネルギー計算を含む分子間相互作用の解析や、分子認識メカニズムの解明、およびその理論的手法の開発が挙げられる。また、生体内化学反応に関する理論的アプローチや、ホールディングを含むコンフォメーション変化の追跡なども対象となる。さらに、これらの分子科学シミュレーションに加え、タンパク質や低分子の立体構造情報を用いた、情報科学的アプローチも本分野に含まれると考えて頂きたい。

第二分野

インシリコ創薬 (*In silico* drug discovery)

第二分野分野長 東京大学 創薬オープンイノベーションセンター 多田 幸雄

コンピュータを利用した創薬研究およびそれに関わるテクノロジー

<Keywords:> コンピュータを利用した薬品設計, *de novo* 医薬品設計, フラグメントに基づく医薬品設計, インシリコ創薬技術, 化合物に基づく医薬品設計, インシリコスクリーニング, 構造活性相関, 構造に基づく医薬品設計, バーチャルスクリーニング, ドラッグ・デザイン

インシリコ創薬はコンピュータを利用した様々なテクノロジーを用いて、論理的に新薬を創製する事と言える。従って、当分野はフラグメントに基づく医薬品設計やインシリコスクリーニング等、標的立体分子の構造情報に基づく手法、および化合物の情報に基づいた構造活性相関解析等による創薬の実行に関わる論文のみならず、これに関わる新しいテクノロジーや手法に関する論文の投稿を期待している。

一方、論理的創薬を実行する上で、現在のインシリコ創薬テクノロジーの適応限界や課題を知ること重要と考えられる。そこで、例えば Pearlman, D. A. ; Charifson, P. S. Are free energy calculations useful in practice? A comparison with rapid scoring function for the p38 MAP kinase protein system. *J. Med. Chem.* 2001, 44, 3717-3423. の様に、実例を踏まえて問題を提起した論文投稿も期待される。

第三分野

バイオインフォマティクスとその医学応用

(Bioinformatics and its applications in medicine)

第三分野分野長 東北大学 東北メディカル・メガバンク機構 荻島 創一

疾患のシステム的モデリングや、ゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームなどの網羅的分子情報の解析手法の開発、およびこれらの創薬のための応用研究

<Keywords:> 疾患オミックス解析, 臨床バイオインフォマティクス, トランスレーショナルシステム生物学, がんシステム生物学, システム創薬, システム分子医学, P4(predictive, preventive, personalized, and participatory) 医学, 次世代シーケンシング, 大規模データの相関解析, 生物学的ネットワーク分析, パスウェイ解析

本分野では、疾患のシステム的モデリングや、ゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームなどの網羅的分子情報の解析手法の開発、およびこれらの創薬のための応用研究などを取扱う。本分野のキーワードは疾患オミックス解析、臨床バイオインフォマティクス、トランスレーショナルシステム生物学、がんシステム生物学、システム創薬、システム分子医学、P4(predictive, preventive, personalized, and participatory) 医学、次世代シーケンシング、大規模データ解析、生物学的ネットワーク分析、パスウェイ解析などである。

第四分野

医薬品研究と ADMET (Information and computing approach for drug design and ADMET study)

第四分野分野長 松山大学 薬学部 水間 俊

医薬品の開発ならびに使用に関わる各種研究および薬物動態と毒性 (ADMET) に関するウェットならびにドライ研究

<Keywords:> ファーマコインフォマティクス, ファーマコキネティクス, ファーマコメトリクス, トキシコキネティクス, ファーマコダイナミクス, 薬物動態と毒性, 構造物性相関 (SPR), 構造特性相関 (SCR), ファルマコフォア, 酵素の活性調節, 酸化ストレスと幹細胞, メタボロミクス

第4分野では、医薬品の開発ならびに使用に関わる各種研究および薬物動態と毒性 (ADMET) に関するウェットならびにドライ研究を主な対象としている。医薬品へ繋がる可能性のある化合物や医薬品そのものに関する研究やそれらを促進させる方法論などの投稿を期待している。

この分野のキーワードは、ファーマコインフォマティクス、ファーマコキネティクス、ファーマコメトリクス、トキシコキネティクス、ファーマコダイナミクス、薬物動態と毒性、構造物性相関 (SPR)、構造特性相関 (SCR)、ファルマコフォア、メタボロミクス、酵素活性調節、酸化ストレス、幹細胞などである。しかしながら、これらに限定されるものではなく、上述の内容に関連しているものであれば、投稿の際に新たなキーワードを提案して頂き、順次加えて行きたい。

最後に、この度 CBIJ が一新されることになったが、この機会に分野長としては、会員からの投稿を待つだけでなく、本分野関連の研究動向を見ながらこちらから声を掛けさせて頂き、執筆依頼をさせて頂くことなども考えている。本ジャーナルを通して新たな研究領域が創出されるくらいの場としたい。

第五分野

上記に属さない先進的研究 (Emerging new technology)

第五分野分野長 神戸大学大学院 システム情報学研究所 田中 成典

化学、生物学、情報学の境界領域に関連する先進的研究、および分子毒性学、合成生物学、分子ロボティクス、iPS 創薬、アカデミア創薬などの新興領域の研究

<Keywords:> 分子毒性学, 合成生物学, 分子ロボティクス, DNA ナノ構造, iPS 創薬, アカデミア創薬

CBI 学会では従来、化学、生物学、物理学、情報学、計算科学の最新の知見を医療・創薬等の先端研究に適用・応用する領域を主に扱ってきたが、将来の展開を見据え、これらに属さない境界領域に関連する先進的研究や合成生物学、分子ロボティクス、バイオナノテクノロジー、量子システム生物学、分子毒性学、iPS 創薬、アカデミア創薬、ハイパフォーマンスコンピューティング、量子情報処理などの新興領域も広く受け入れる「分野5」を創設した。例として、分子コンピューティングや量子計算機、人工遺伝子回路、人工タンパク質合成系などの新たな可能性の探求や、様々な外場・刺激を利用した新概念素子・制御系の提案、基礎医学における新規計測・解析・治療法の開拓、シミュレーションや最適化の新手法の開発、さらには、新たなコミュニティーやネットワーク形成への提案等も含まれる。



各種委員会報告

【創薬研究会運営委員会】

第 7 回創薬研究会運営委員会

日時：2013 年 7 月 10 日 (水) 10:00 - 12:00

場所：東京工業大学 CIC リエゾン 508 (東京都港区芝浦 3 - 3 - 6)

出席者 (敬称略)：石川 誠 (日産化学工業)、大元 和之 (小野薬品工業)、岡部 隆義 (東大)、小田 晃司 (大正製薬)、片倉 晋一 (第一三共)、上村 みどり (帝人ファーマ)、嶋根 みゆき (中外製薬)、田上 宇乃 (味の素)、谷村 隆次 (東レ)、砂田 真志 (田辺三菱製薬)、高土居 雅法 (杏林製薬)、中嶋 久士 (興和)、服部 一成 (塩野義製薬)、福澤 薫 (みずほ情報総研)、水間 俊 (東薬大)、望月 祐志 (立大)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、町田 規子 (事務局)

資料：(1) 運営委員会次第

(2) 講演会予定一覧

議事：(1) 運営委員メンバーの評議員就任について

(2) 創薬研究会の新しい企画について

(3) 各講演会の企画進捗状況

(4) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議

報告事項：(1) 新メンバー紹介

(2) 2013 年大会について

(3) 2014 年大会について

第 8 回創薬研究会運営委員会

日時：2013 年 9 月 5 日 (木) 10:00 - 12:30

場所：東京大学山上会館 001 会議室 (東京都文京区本郷 7 - 3 - 1)

出席者 (敬称略)：石川 誠 (日産化学工業)、江口 晃史 (CTCLS)、小田 晃司 (大正製薬)、片倉 晋一 (第一三共)、狩野 敦 (菱化システム)、小長谷 明彦 (東工大)、嶋根 みゆき (中外製薬)、砂田 真志 (田辺三菱製薬)、高岡 雄司 (アクセルリス)、高土居 雅法 (杏林製薬)、田上 宇乃 (味の素)、田口 淳子 (大鵬薬品工業)、多田 幸雄 (東大)、谷村 隆次 (東レ)、中嶋 久士 (興和)、福澤 薫 (みずほ情報総研)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、塚田 優子 (事務局)

資料：(1) 運営委員会次第

(2) 講演会予定一覧

議題：(1) 評議員選出方法について確認

(2) 創薬研究会の新しい企画について _ アカデミアとの交流、講師先生方との懇談等

(3) 各講演会の企画進捗状況報告

(4) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議

【執行部会】

第 7 回執行部会

日時：平成 25 年 7 月 24 日 (水) 18:10 - 20:15

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 号室 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：田中 博、河合 隆利、片倉 晋一、岡部 隆義、本間 光貴、望月 祐志、多田 幸雄、高岡 雄司、小長谷 明彦、
小澤 陽子 (事務局)

欠席者：水間 俊、田中 成典

資料：(1) 2013 年大会プログラム

(2)-1 創薬研究会運営委員会 (7/10) 議事録 (案)

(2)-2 講演会予定

(3) CBI ジャーナル編集委員会 (6/27) 議事録

(4) 第 343 回 CBI 学会研究講演会 (11/15) プログラム

(5)-1 第 5 回 FMO 研究会案内 (9/18)

(5)-2 FMO 研究会今後の方針

(6)-1 ロゴのアンケート結果

(6)-2 ロゴ案 4 つ

(7) 高岡委員からのメール

(8) 文部科学省研究振興局への「若手科学者賞受賞候補者の推薦」提出書類 (回覧)

(9)-1 合計残高試算表

(9)-2 財務状況の説明

議題：(1) 2013 年大会について

(2) 創薬研究会運営委員会報告

(3) CBI ジャーナル編集委員会報告

(4) 関西部会の報告

(5) FMO 研究会活動予定の報告

(6) ロゴの決定について

(7) 高岡委員の提案について

(8) 文部科学省研究振興局からの「文部科学大臣表彰科学技術賞及び若手科学者賞受賞候補者の推薦について」に関して

(9) 財務状況の報告

(10) 2014 年大会について

第 8 回執行部会

日時：平成 25 年 9 月 11 日 (水) 18:10 - 19:50

場所：キャンパスイノベーションセンター東京 506 号室 (東京工業大学・田町、東京都港区芝浦 3-3-6)

出席者：田中 博、河合 隆利、岡部 隆義、高岡 雄司、小長谷 明彦、塚田 優子 (事務局)

欠席者：片倉 晋一、多田 幸雄、田中 成典、本間 光貴、水間 俊、望月 祐志

資料：(1) 2013 年大会プログラム、チュートリアルセッション、フォーカストセッション詳細

(2)-1 創薬研究会運営委員会 (9/5) 議事録 (案)

(4) ロゴ色見本

(2)-2 講演会予定

(5) 大会の委員について

(3) 2014 年大会会場費見積書

(6) ナレッジサロン利用案内

議題：(1) 2013 年大会進捗状況確認

(6) CBI 学会ロゴについて

(2) 2014 年大会について

(7) ICA 主催セミナー共催について

(3) 2016 年大会会場について

(8) 大会ポスター受賞者特典について

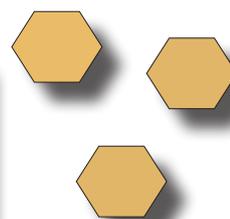
(4) 大会委員の名称等について

(9) Web 会議システム導入について

(5) 創薬研究会運営委員会報告

(10) 執行部会の定例化について

研究講演会 記録



第 341 回 CBI 学会研究講演会

「イオンチャネル創薬と Allosteric Modulators」

開催趣旨：

イオンチャネルは生体機能に重要な役割を有しており、大変魅力的な創薬ターゲットである。チャネルの開閉は主にリガンドの結合あるいは電位変化でコントロールされている。この主開閉機構に加え、チャネルタンパク質を形成する subunit 同士の相互作用、リン酸化、ニトロシル化、アミノ酸、膜構成脂質など様々な因子によりチャネル開閉は調節を受けている。ところで、リガンド gated-channel においてはリガンド結合部位と異なった場所に結合し、チャネルの挙動に影響を与える化合物が allosteric modulator として古くから知られていた。しかし、イオンチャネル創薬の現場では評価手法の限界から、主にリガンドの結合部位をターゲットとした化合物が探索され inhibitor や activator が見出されてきた。近年、チャネルタンパクの構造の情報、種々 modulation メカニズムの解明、allosteric modulator 特異的な部位の存在が明らかにされ、またイオンチャネルチャネル評価技術の進歩もあり、サブタイプ選択性を有した、より安全域の広い化合物がイオンチャネル創薬で追求されるようになった。実際、多くの positive allosteric modulator (PAM) や negative allosteric modulator (NAM) が臨床開発のステージにある。今回の研究講演会では演者の先生方から allosteric modulation の基礎研究および実際に臨床開発に成功した事例を紹介していただき、allosteric modulator 創薬を考える場としたい。

日時：2013 年 8 月 2 日（金）13:20 - 17:40

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：澤田 光平（エーザイ株式会社）、森 泰生（京都大学）

プログラム：

- (1) 13:20 - 13:30 はじめに
- (2) 13:30 - 14:25 「脂質活性因子、PIP₂ と DAG による
受容体作動性 TRPC チャネルの Self-limitng Regulation」
森 誠之（京都大学大学院工学研究科）
- (3) 14:25 - 15:20 「ABC トランスポータ CFTR チャネルの ATP 駆動ゲーティング機構」
相馬 義郎（慶應義塾大学医学部）
- (4) 15:40 - 16:35 「リガンド作動性カリウムチャネルの開閉調節機構：分子内ドメイン間の
allosteric coupling を支えるリガンド受容ドメイン内の構造変化」
稲野辺 厚（大阪大学大学院医学研究科）
- (5) 16:35 - 17:30 「ペランパネルの創薬研究、イオンチャネル型グルタミン酸受容体拮抗剤の創薬研究の難しさ」
花田 敬久（エーザイ株式会社）
- (6) 17:30 - 17:40 まとめ



第 342 回 CBI 学会研究講演会

「精密なドラッグデザイン 共有結合化合物を題材として」

開催趣旨：

近年、蛋白質と低分子化合物との複合体構造情報は飛躍的に増加しているが、量のみならず質の向上も大きく、より精度の高い構造情報がもたらす詳細な蛋白質と化合物との相互作用情報は分子設計において恩恵をもたらしている。蛋白質と化合物との相互作用において最も強力なものは共有結合であり、阻害剤の効果を考えて非常に強力な阻害剤の開発を可能にする。本来、共有結合を有する阻害剤は既知の薬剤で多く知られているが、これまではその作用機序は後から判明したものが多く。一方、最近では前述の詳細な相互作用情報の増加を背景に、共有結合を有する薬剤の分子設計が盛んに行われており、構造情報を基にした理論的なアプローチの有用性が証明されつつある。今回、詳細な相互作用情報をもたらす最新の構造解析手法の講演をはじめとして、共有結合の薬剤を研究されている第一線の先生方、ならびに計算の視点からそのような薬剤の解析に関して IT 企業の方から講演いただくことを企画いたしました。ドラッグデザインに携わる研究者の方々をはじめとして、CBI 学会の方を含め、多くの方々のご参加を御願いたします。

日時：2013 年 9 月 5 日（木）13:30 - 17:50

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：片倉 晋一（第一三共株式会社）、田上 宇乃（味の素株式会社）

プログラム：

- (1) 13:30 - 13:40 開催の挨拶
- (2) 13:40 - 14:20 「可逆性共有結合型プロテアーゼ阻害剤の分子設計」
大元 和之（小野薬品工業株式会社）
- (3) 14:20 - 15:10 「中性子と放射光の相補的な利用による創薬標的タンパク質の立体構造解析」
玉田 太郎（日本原子力研究開発機構）
- (4) 15:10 - 16:00 「反応機構依存型 γ -グルタミルトランスペプチダーゼ阻害剤の開発と応用」
平竹 潤（京都大学化学研究所）
- (5) 16:10 - 16:50 「ホウ素系阻害剤と EGFR チロシンキナーゼの相互作用」
福澤 薫（みずほ情報総研株式会社）
- (6) 16:50 - 17:30 「New Covalent Docking Protocol: Glide+Prime」
島田 裕三（シュレーディングー株式会社）
- (7) 17:30 - 17:50 総合討論



今後の研究講演会 予定



第 343 回 CBI 学会研究講演会

「海外の事例に学ぶ、新しい形の産官学連携」

日時：2013 年 11 月 15 日（金）13:25 - 17:45

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル タワー B 10 階
カンファレンスルーム B05-B07

世話人：水口 賢司（医薬基盤研究所）、森 浩禎（奈良先端科学技術大学院大学）、藤渕 航（京都大学）

第 344 回 CBI 学会研究講演会

「医薬品開発におけるモデリング&シミュレーション（M&S）の有用性」

日時：2013 年 12 月 10 日（火）13:20 - 18:50

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：杉山 雄一（理化学研究所）、千葉 康司（横浜薬科大学）

第 345 回 CBI 学会研究講演会

「創薬フローにおけるデータベース活用」

日時：2014 年 1 月 9 日（木）13:30 - 17:30

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：緑川 淳（ワールドフュージョン）、谷村 隆次（東レ）、大元 和之（小野薬品工業）



第 346 回 CBI 学会研究講演会

「悪性脳腫瘍のALA光線力学治療に向けて：In silico創薬分子デザインから臨床応用へ」

日時：2014 年 2 月 24 日（月）13:30 - 17:30

場所：東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷 7 - 3 - 1）

世話人：広野 修一（北里大学）・石川 智久（理化学研究所）

第 6 回 FMO 研究会

「FMO法の創薬への適応例とその展望」(CBI学会2013年大会フォーカストセッション)

日時：2013 年 10 月 31 日（木）15:30 - 17:00

場所：タワーホール船堀 4 階研修室（東京都江戸川区船堀 4 - 1 - 1）

世話人：多田 幸雄（東京大学創薬オープンイノベーションセンター）



CBI 学会誌 第 1 卷 第 2 号

2013 年 10 月 31 日 発行

制作責任：小長谷 明彦

制作：小澤 陽子 塚田 優子 高橋 まき 町田 規子

湯川 真澄 小宮山 直美

発行：CBI 学会

本著作物の著作権は著者にあり、CBI 学会は、本著作物に関する
冊子および電子媒体による複製、配布、改変、再出版の権利を持つ。

