

情報計算化学生物学会誌

CBI 学会誌



第 2 卷第 2 号

2014 年 4 月 30 日発行

CBI 学会誌

第2卷 第2号

2014年4月30日発行

CBI 学会

目次

(1) CBI 学会 2014 年大会「iPS, ion channel, <i>in silico</i> が拓く 新しい創薬パラダイム」開催にあたって 澤田 光平 (CBI 学会 2014 年大会大会長、エーザイ株式会社)	1
(2) CBI 学会との 30 年間は <i>in silico</i> 創薬実践への 30 年間 平山 令明 (東海大学 特任教授)	2
(3) 各種委員会報告	3
(4) CBI の関心領域 第 5 分野分野長変更のお知らせ	7
(5) 講演会報告・予告	8

CBI 学会 2014 年大会

「iPS, ion channel, *in silico* が拓く 新しい創薬パラダイム」開催にあたって

In silico および iPS 細胞技術を活用した イオンチャンネル創薬の将来展望



CBI 学会 2014 年大会大会長

澤田 光平 (エーザイ株式会社)

イオンチャンネルは膜内在性のタンパク質で膜内外のイオン濃度、膜電位の違いを利用して細胞機能の制御を行う。心臓の興奮収縮、神経伝達と言うに及ばず、インシュリンなどのホルモン遊離から免疫細胞の活性化など、生体の生理機能に深く関与しており、生命維持を司る基本的な分子である。1952年にホジキン、ハクスリーがイカ巨大神経の電気現象を説明するために、計算科学的手法を用いて神経細胞膜にNaあるいはKイオンを独立に通過させる経路の存在を予測した。その後、1970年代になってパッチクランプ法が開発され細胞膜にある一つのイオンチャンネルの電気現象が記録できるようになり、ホジキンらによって予測された細胞膜のイオンの通路が実際に証明されるに至った。また、遺伝子の解読、タンパク質発現研究の進展で非常に多くのイオンチャンネルが創薬の標的タンパクであることが認識され、また自動パッチクランプの開発と相俟って2000年以降イオンチャンネル創薬という分野が大きく進展した。

しかし、イオンチャンネルに関する分子的理解、評価技術の進化があったにもかかわらず、創薬での成功確率は今でもそれほど高くない。この原因として、膜電位によって開閉が制御されるイオンチャンネルでは、生体内に特異的なリガンドが存在せず、選択性を持った化合物が得られにくいことがある。また、細胞では多くの種類のイオンチャンネルが細胞全体の電気現象の制御に複雑にかかわっているだけでなく、イオンチャンネル自体もリン酸化やカルシウム、また複数のサブユニットの会合などにより複雑に制御されている。即ち、創薬ターゲットとした1つのイオンチャンネルだけ発現させた評価系だけでは、細胞全体の作用を予測できないことも創薬難度を高くしている原因の1つであると考えられる。

これまで創薬研究ではヒト遺伝子情報に基づき、タンパク質発現細胞を作成し、ヒトタンパク質と強い相互作用を示す薬物を探索し創薬成功確率向上を目指してきた。しかし、ヒト

試料の入手は難しく、細胞、更に組織、臓器、最終的には生体での薬効および毒性予測は、動物実験からの推測に頼るしかなく、ヒトでの予測確度は低いものであった。細胞機能に必要な全てのイオンチャンネルや細胞内情報伝達機構などが備わった、ヒト細胞が利用できれば、作用を総合的に予測することも可能になると考えられる。ヒトiPS細胞技術の進歩によって、種々のヒト細胞、また小さな組織試料も創薬研究に応用できるようになり、薬効および毒性の予測確度向上に寄与するものと期待される。しかし、このような技術が進んでもタンパク質との相互作用から生体での効果検証までにおいて、すべての段階を実験で埋めることは現実的に難しいだけでなく、時間およびコストという観点からも決して理想的ではない。

この使命を請け負うことのできるのは、これまで蓄積された生体情報と、その情報に基づいて計算によって解答を導き出す計算科学であろう。タンパク質と薬物の相互作用、細胞内の複雑な情報伝達、細胞間同士の相互作用、更にはホルモンや神経なども含めた生体での反応予測など、コンピューターの情報処理能力向上はこれらを可能にしている。薬物のイオンチャンネルに対する作用情報と心臓シミュレーションを組み合わせた、不整脈誘発の副作用予測 *in silico* システム構築の具体的な取り組みも進んでおり、その結果も本大会で発表される予定である。また、この予測とヒトiPS細胞由来心筋での実験結果を統合することで、より信頼性の高い判断が可能になると考えられる。

本大会ではイオンチャンネル、iPS細胞、*in silico* テクノロジーの分野でご活躍の先生方に最新の研究成果をお話していただくとともに、ご参加いただく研究者の皆様が活発な議論をおこない、最新科学の融合によってイオンチャンネル創薬に新たな飛躍が図られることを期待するところである。

CBI 学会との 30 年間は *in silico* 創薬実践への 30 年間

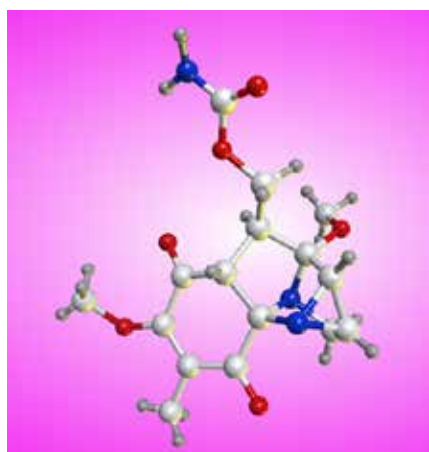


平山 令明

東海大学 特任教授
CBI ジャーナル編集委員

今にして思うと、Ehrlich の「magic bullet」の概念に強く魅かれたのが、私の *in silico* 創薬研究のプロローグだったようです。Sobell が actinomycin D と DNA の原子レベルでの相互作用の様子を X 線解析で示した論文に刺激され、抗癌剤作用の分子機構の解明、抗癌剤の改良、さらには新しい抗癌剤の創製・発見という夢に引っ張られ、迷うことなく大学院博士課程を中退して、協和発酵工業（株）に入社しました。1975 年のことです。当時、その東京研究所には「自由」の雰囲気溢れており、優秀な先輩研究者がたくさんいました。しかし、今でいう *in silico* 創薬法について教えて頂ける先輩はいませんでした。

10 年近くは独学をしていましたが、1984 年にふとしたことがきっかけで、CBI 学会の創始者である神沼二眞先生に遭遇しました。以来、CBI 研究会（CBI 学会の前身）は私の重要な勉強の場になりました。多くの先生や先輩によって語られるご自身の研究や哲学、さらに独善的とも思える解釈にも素直に反応したものです。協和発酵が CBI 研究会への自由な参加を許可して下さったので、たくさんのセミナーに出席し、時に過激とも思える議論にも耳を傾けながら、実に多くのことを学ぶことができました。*in silico* 創薬に関する成書など殆どなく、他の関連学会での *in silico* 創薬に対する眼が極めて冷たく懐疑的であった時代でした。私にとって、CBI 研究会は正に得難い唯一の学校でした。



20 世紀の最後の四半世紀に猛烈な勢いで進展した生命科学およびコンピュータ科学、そして何にも増して、地道に科学的基盤を整備して来た多くの研究者のかけがいのない努力が総合されることにより、*in silico* 創薬の手法は遂に現実のものになったと思います。この間、私自身は時々挫けそうになりながらも、多くの患者さんの QOL を改善できる「magic bullets」の創製を目指して（夢見て！）、*in silico* 創薬への踏み分け道を歩いて来ました。御陰様で、私が進んできた道の先には、幾つかの明るい灯が見えてきました。これは偏に、時間やエネルギーを惜しむことなく優しくご指導そして激励して下さいた多くの CBI 研究会（学会）の諸先輩の御蔭であり、この場を借りて改めて厚く御礼申し上げます。

委員会報告

Committee

【評議員会】

第 3 回評議員会

日時：2013 年 3 月 26 日 (水) 18:05 - 18:25

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 (敬称略)：田中 博、石川 智久、岡部 隆義、片倉 晋一、河合 隆利、小長谷 明彦、多田 幸雄、中田 吉郎、西沢 元仁、
本間 光貴、水間 俊 (スカイプ)、小澤 陽子 (事務局)

欠席 (敬称略)：相田 美砂子、磯野 克己、一石 英一郎、岡崎 康司、古明地 勇人、杉山 雄一、高岡 雄司、田中 成典、富田 勝、
中馬 寛、藤 博幸、中井 謙太、広野 修一、船津 公人、美宅 成樹、宮本 秀一、望月 祐志、山内 あい子

資料：(1) 第 3 回評議員会議事次第

(2) 新組織図 (案)

議題：(1) 評議員選挙について

(2) 2014 年度評議員候補者案について

【創薬研究会運営委員会】

第 9 回創薬研究会運営委員会

日時：2014 年 1 月 9 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)、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)、上村 みどり
(帝人ファーマ)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、嶋根 みゆき (中外製薬)、砂田 真志 (田辺三菱製薬)、高土居 雅法
(杏林製薬)、田上 宇乃 (味の素)、多田 幸雄 (東京大学)、谷村 隆次 (東レ)、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)、松本 俊二 (富士通)、望月 祐志 (立教大学)、塚田 優子 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：江口 晃史 (CTCLS)、岡部 隆義 (東京大学)、大元 和之 (小野薬品)、河合 隆利 (エーザイ)、新美 達也
(アステラス製薬)、高岡 雄司 (アクセルリス)、田口 淳子 (大鵬薬品)、田中 博 (東京医科歯科大学)、緑川 淳 (ワールド
フュージョン)、水間 俊 (松山大学)

資料：(1) 運営委員会次第

(2) 2013 年大会参加人数

(3) 2013 年研究講演会参加人数及び収支

(4) 第 349 回 CBI 学会研究講演会のお知らせ

(5) 特別講演希望講師一覧

(6) 講演会予定一覧

(7) CBI 学会研究講演会企画についての確認とお願い

- 議題：(1) 2013 年大会の報告
(2) 2013 年研究講演会の報告
(3) 関西西部会の報告
(4) 特別講演の講師決定
(5) 各講演会の企画進捗状況報告
(6) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議
(7) CBI 研究講演会企画についてのお願い

第 10 回創薬研究会運営委員会

日時：2014 年 3 月 25 日 (火) 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)：大元 和之 (小野薬品)、岡部 隆義 (東京大学)、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 (東京工業大学)、嶋根 みゆき (中外製薬)、高岡 雄司 (アクセルリス)、高土居 雅法 (杏林製薬)、多田 幸雄 (東京大学)、中嶋 久士 (興和)、水間 俊 (松山大学)、塚田 優子 (CBI 学会事務局)

欠席者 (敬称略)：石川 誠 (日産化学)、江口 晃史 (CTCLS)、上村 みどり (帝人ファーマ)、河合 隆利 (イーザイ)、砂田 真志 (田辺三菱製薬)、田上 宇乃 (味の素)、田口 淳子 (大鵬薬品)、田中 博 (東京医科歯科大学)、新美 達也 (アステラス製薬)、谷村 隆次 (東レ)、服部 一成 (塩野義製薬)、福澤 薫 (みずほ情報総研)、松本 俊二 (富士通)、緑川 淳 (ワールドフュージョン)、望月 祐志 (立教大学)

議題：第一部 10:00 - 10:30

- (1) 2013 年 NPO 総会資料説明 (資料 1) - 小長谷理事
- (2) 2013 年評議員会資料説明 (資料 2) - 小長谷理事
- (3) 委員会名称確認
- (4) 各講演会の企画進捗状況報告 (資料 3)
- (5) 今後の講演会企画についてグループ毎に討議
- (6) 報告事項

①アステラス製薬新美達也様 グループ 5 へ

②片倉晋一主査所属変更の連絡

第二部 10:30 - 11:30

特別講演

小長谷 明彦先生 (東工大 総合理工学研究科 知能システム科学専攻)

「分子ロボティクスの展望と課題」



【関西部会】

第 6 回関西部会運営委員会

日時：2014 年 2 月 15 日（金） 13:00 - 14:30

場所：（財）都市活力研究所会議室（大阪市北区大深町 3 - 1 グランフロント大阪 タワー C 7F）

出席者（敬称略）：田中 成典（CBI 関西部会長、神戸大）、小長谷 明彦（東工大）、坂田 恒昭（大阪大／塩野義製薬）、森 浩禎（奈良先端大）、木下 誉富（大阪府立大）、塩田 武司（塩野義製薬）、早乙女 周子（京都大）、田口 隆久（産総研）、志水 隆一（（財）都市活力研究所）、牛尾（書記、神戸大）

欠席者（敬称略）：正城 敏博（大阪大）、藤淵 航（京都大）、鶴田 宏樹（神戸大）、山崎 一人（大日本住友製薬）、奥野 恭史（京都大学）、水口 賢司（医薬基盤研究所）、森 一郎（神戸大）

- 議題：(1) CBI 学会関西部会 副部会長について
(2) 4 月 11 日（金）CBI 学会研究講演会（グランフロント大阪）について
(3) 次々回 CBI 学会関西部会講演会の企画について
(4) 関西部会の今後の進め方
(5) 次回関西部会運営委員会の予定について

【執行部会】

第 11 回執行部会

日時：2014 年 1 月 27 日（月） 18:15 - 20:45

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（敬称略）：河合 隆利、望月 祐志、岡部 隆義、片倉 晋一、小長谷 明彦、多田 幸雄、本間 光貴、水間 俊（スカイプ）、小澤 陽子（事務局）

欠席者（敬称略）：田中 博、田中 成典、高岡 雄司

- 議題：(1) 大会のプレナリー講師選定の進捗状況確認
(2) 大会の予算について
(3) HP 掲載事項の確認（参加登録要綱、ポスター投稿詳細）
(4) 講師依頼状の雛形の確認
(5) 出展企業プロモーションについて
(6) 今後のスケジュール

第 12 回執行部会

日時：2014 年 2 月 19 日（水） 18:15 - 20:25

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（敬称略）：田中 博、岡部 隆義、片倉 晋一、河合 隆利、小長谷 明彦、高岡 雄司、多田 幸雄、本間 光貴、水間 俊（スカイプ）、小澤 陽子（事務局）

欠席者（敬称略）：田中 成典、望月 祐志

- 資料：(1) 連合大会プログラム(案)
(2) 評議員会資料(ドラフト)
(3) NPO 総会資料(ドラフト)
(4) CBI Journal 査読フローについて(案)
(5) 会員からの提案メール
- 議題：(1) 2014 年生命医薬情報学連合大会(仙台)について
(2) 評議員会 議案策定
(3) 総会 議案策定(決算案、予算案、事業報告)

第 13 回執行部会

日時：2014 年 3 月 12 日(月) 18:00 - 20:50

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(敬称略)：田中 博、岡部 隆義、片倉 晋一、河合 隆利、小長谷 明彦、多田 幸雄、望月 祐志、水間 俊(スカイプ)、
小澤 陽子(事務局)

欠席者(敬称略)：高岡 雄司、本間 光貴、田中 成典

- 資料：(1) 現時点での大会プログラム
(2) 出展の申し込み状況
(3) フォーカストセッション案
(4) 広報ポスター試作版
(5) 連合大会 CBI セッション(案)
(6) 連合大会 プログラム(案)
(7) 評議員会資料 組織図
(8) NPO 総会資料差替えおよび追加の資料
(9) 計算毒性学研究会設立趣旨
(10) 計算毒性学研究会設立賛同者名簿
(11) 関西部会議事録(20140215)
- 議題：(1) セッションの現状報告
(2) 支出について
(3) 収入見込み
(4) フォーカストセッションの現状と今後の進め方
(5) 協賛依頼団体の確認
(6) 広報ポスター試作版について
(7) 今後のスケジュール
(8) 4月中旬に開催予定のプログラム委員会の日程決定
(9) 2014 年生命医薬情報学連合大会(仙台)について
(10) 評議員会 議案策定(組織図)
(11) 総会 議案策定
(12) 計算毒性学研究会設立について
(13) 関西部会の報告
(14) 「CBI 夏の合宿 2014 in 道後」について
(15) 4月からの創薬研究会法人会員の変更について



【総会】

2013 年度 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 総会

日時：2014 年 3 月 26 日 (水) 18:25 - 19:30

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9名、委任状3名、正会員総数13名

資料：(1-1) CBI 学会 2013 年度活動報告 (案)

(1-2) 2013 年度研究講演会参加者人数および収支

(2-1) CBI 学会 2013 年大会完了報告

(2-2) CBI 学会 2013 年大会会場別参加人数表

(2-3) CBI 学会 2013 年大会収支報告

(3) CBIJ の経年変化 (投稿状況、経費など)

(4-1) 2013 年活動計算書、計算書類の注記

(4-2) 2013 年貸借対照表

(4-3) 2013 年財産目録

(4-4) 2013 年監査報告書

(5) CBI 学会 2014 年度活動計画 (案)

(6) CBI 学会 2014 年大会概要

(7) 2014 年度の研究講演会予定 (案)

(8) CBI 学会 2014 年度予算 (案)

(9) CBI 学会 2014 年度役員名簿

議事：第 1 号議案 2013 年度活動報告

第 2 号議案 2013 年度決算報告・監査報告

第 3 号議案 2014 年度活動計画

第 4 号議案 2014 年度予算

第 5 号議案 2014 年役員名簿の報告



**CBI の関心領域
第 5 分野分野長の変更のお知らせ**

新設されました分野 5 では新しいジャンルの研究活動をカバーしています。

2013 年度の CBI 学会年会では、特に分子ロボティクス関係のポスター発表が多く、順調な滑り出しとなりましたので、当該領域の研究開発にお詳しい小長谷先生に分野長になっていただき、さらなる展開を目指すことになりました。

研究講演会 記録

第 346 回 CBI 学会研究講演会

「蛋白質のシミュレーションによる機能の解明」

開催趣旨：

これまで、タンパクの低分子認識に関する研究が数多くなされてきました。計算科学の分野では、LBDD、SBDD と、それぞれ様々な手法が発展してきています。特に SBDD の分野では、ドッキングやインディース・フィット・ドッキングといったドッキングの研究が数多く報告されてきています。近年、京コンピュータの利用を例に見ましても、動的なタンパク質の動きを捉えた低分子認識の研究も可能となってきた計算から実験まで、タンパク質の動きに着目した多方面での研究についてご講演いただきます。

日時：2014 年 2 月 13 日（木）13:15 - 17:55

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：石川 誠（日産化学工業）、砂田 真志（田辺三菱製薬）、高岡 雄司（アクセルリス）

プログラム：

- (1) 13:15 - 13:25 開催趣旨説明
- (2) 13:25 - 14:15 「Molecular Dynamics in Drug Discovery」
Roy Kimura（シュレーディングー株式会社）
- (3) 14:15 - 15:05 「創薬研究における MD シミュレーションの活用 - アンドロゲン受容体におけるアゴニスト/アンタゴニストの違い -」
永田 尚也（科研製薬株式会社）
- (4) 15:15 - 16:05 「動的性質を生かした創薬研究」
亀田 倫史（産業技術総合研究所）
- (5) 16:05 - 16:55 「生きた細胞中での蛋白質立体構造決定とダイナミクス解析」
池谷 鉄兵（首都大学東京）
- (6) 17:05 - 17:55 「細胞内環境での蛋白質の運動と分子認識」
杉田 有治（理化学研究所）



第 347 回 CBI 学会研究講演会

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

開催趣旨：

脳腫瘍の発生率は人口 10 万人に対して約 12 人ですが全体として悪性のものが多く、治療は容易ではありません。その最も大きな理由は、脳という重要な組織に発生しているために、腫瘍が正常脳の中に浸潤した部分を広く切除できないことによります。近年、腫瘍細胞をより特異的に描出可能な 5-アミノレブリン酸 (ALA) を導入し、脳腫瘍の摘出率が向上しました。私達は、ALA の代謝産物で赤色蛍光を持つプロトポルフィリン IX が腫瘍細胞に特異的に蓄積する分子機構を解明し、光線力学療法を進化・向上させるための研究開発を行ってきました。その結果、ABC トランスポーター ABCG2 の阻害剤を併用することによって、プロトポルフィリン IX の癌細胞外への輸送を強く阻害して、ALA-光線力学療法の効率が顕著に向上する事を突き止めました。定量的構造活性相関 (QSAR) 解析、分子軌道計算法、3 次元ファーマコフォア解析法等を駆使して、ABCG2 を阻害する創薬分子デザインを展開し、ALA-光線力学療法の治療効果を向上させるための *in vitro* と *in vivo* の実験を繰り返し実施して臨床応用に結び付ける事に成功しました。そのような背景を鑑みて、CBI 学会の研究講演会をオーガナイズして、皆様にこれまでの研究成果と将来展望をご報告したいと存じます。

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)

協賛：日本オミックス医療学会、日本薬物動態学会、ポルフィリン-ALA 学会



プログラム：

- (1) 13:30 - 14:10 「高速スクリーニングに基づく新規 QSAR 解析」
石川 智久 (理化学研究所)
- (2) 14:10 - 14:50 「ABCG2 トランスポーターリガンドの 3 次元ファーマコフォア解析」
山乙 教之 (北里大学)
- (3) 15:00 - 15:40 「細胞系と動物実験による proof-of-concept (POC)」
井上 裕貴 (明治薬科大学)
- (4) 15:40 - 16:20 「悪性脳腫瘍の光線力学治療にむけた臨床研究」
梶本 宜永 (大阪医科大学)
- (5) 16:30 - 17:30 「薬物トランスポーター研究の 32 年をふりかえって：高齢者の個別化医療へ新展開」
石川 智久 (理化学研究所)

第 348 回 CBI 学会研究講演会

「Drug Discovery beyond Small Molecule : 中分子創薬への期待」

開催趣旨 :

近年、創薬に於いて、低分子でも高分子でもないペプチドサイズの中分子が、創薬の候補分子として注目されています。低分子医薬品は経口投与が可能で免疫毒性が少ない反面、特異性の低さから副作用が問題になることがあります。一方、高分子のタンパク質医薬品は特異性が高く副作用が少ない反面、適応範囲が狭く免疫毒性の問題があります。そのような中、中分子が両者の特性を併せ持つ可能性が期待されます。特に、最近、中分子の合成技術が飛躍的に進歩して特殊ペプチドが自在に構築できるようになり、研究に大きなはずみが付くことになりました。抗体医薬に代表されるような高分子医薬品についてもその機能を損なわず分子量を小さくする方向での研究が行われるようになってきました。また、ヒト白血球のタイプを決定する HLA が多くの疾患や薬の副作用に関与していることが解明され、HLA が認識するペプチドとの関連に基づく創薬研究も着実に推進されてきています。さらに、中分子創薬を目指したライブラリーの構築や DDS システムの研究も活発に行われており、中分子の創薬研究においてパラダイムシフトが起きています。今回の研究講演会では、中分子創薬を強力に推進されておられる先生方を中心に、中分子創薬における最新の技術や将来ビジョンについてご講演頂きます。

日時：2014 年 3 月 25 日 (火) 13:15 - 17:55

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：上村 みどり (帝人ファーマ株式会社)、服部 一成 (塩野義製薬株式会社)、狩野 敦 (株式会社菱化システム)

プログラム :

- (1) 13:15 - 13:20 開会の挨拶
- (2) 13:20 - 14:20 「マイクロ抗体：進化分子工学による分子標的ペプチドの創出」
藤井 郁雄 (大阪府立大学大学院理学研究科)
- (3) 14:20 - 15:20 「ペプチド化学を基盤とした抗 HIV 剤の創製」
玉村 啓和 (東京医科歯科大学 生体材料工学研究所)
- (4) 15:40 - 16:40 「中分子創薬への挑戦：特殊ペプチド創薬のススメ」
菅 裕明 (東京大学大学院理学系研究科)
- (5) 16:40 - 17:40 「HLA 機能を制御する分子に関する *in silico* 研究」
平山 令明 (東海大学医学部)
- (6) 17:40 - 17:55 総合討論



今後の研究講演会 予定



第 350 回 CBI 学会研究講演会

「ICH M7 ガイドライン (Step2) : ハザード評価の要件～ (Q) SAR 予測法への対応～」

日時：2014 年 5 月 16 日 (金) 13:15 - 18:00

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：中嶋 久士 (興和 (株))、嶋根 みゆき (中外製薬 (株))、福澤 薫 (みずほ情報総研 (株))

第 351 回 CBI 学会研究講演会

「三極の薬物相互作用ガイドラインを踏まえた薬物相互作用の予測の現状と将来展望」

日時：2014 年 6 月 19 日 (木) 10:00 - 17:50

場所：東京大学 弥生講堂 一条ホール (東京都文京区弥生 1-1-1)

世話人：杉山 雄一 (理化学研究所)、佐藤 正延 (医薬品医療機器総合機構)

第 352 回 CBI 学会研究講演会

「HPC (High Performance Computing) の創薬・

医療分野への応用における成果と今後の展望」

日時：2014 年 7 月 11 日 (金) 13:15 - 17:55

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：小田 晃司 (大正製薬 (株))、田上 宇乃 (味の素 (株))、松本 俊二 (富士通 (株))、高土居 雅法 (杏林製薬 (株))

第 353 回 CBI 学会研究講演会

「生体高分子シミュレーション～最先端 QM/MM 法と周辺研究」

日時：2014 年 7 月 29 日 (火) 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：福澤 薫 (みずほ情報総研 (株))、東大生産研)、望月 祐志 (立教大学)

第 354 回 CBI 学会研究講演会

「CBI 学会夏の合宿 2014 in 道後」

日時：2014 年 8 月 8 日 (金) - 9 日 (土)

場所：松山大学 (松山市文京町)、にぎたつ会館 (松山市道後)

世話人：水間 俊 (松山大学)、小長谷 明彦 (東京工業大学)、湯田 浩太郎 (インシリコデータ)



CBI 学会誌 第 2 卷 第 2 号

2014 年 4 月 30 日 発刊

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。

