

# CBI学会誌



第9巻第2号

2021年6月1日発行

# 巻頭言

## 21 世紀における生命科学革命の源とその原動力

養王田 正文

東京農工大学

私が CBI 学会の前身である CBI 研究会に参加したのは、理化学研究所に在籍していた 1995 年頃だったと記憶している。手元にあった 1996 年 -97 年の CBI 研究会事業計画に以下のような記述があった。” CBI 研究会を取り巻く環境は、特に B と I で激変している。B は構造生物学の発展、ゲノム解析の進歩が続いていることである。一方、I はなんといってもインターネット革命に尽きる。インターネット革命は、我々がかつて経験したことのないスケールの革命をもたらしつつある。こうした変化をみつめつつ、新たな事業内容を根本的に見直す。” このように、CBI 研究会は、生命科学や IT の革命を予見していた。しかし、現実はそのをさらに凌駕するものであった。この革命の源と原動力は何なのであろうか。

21 世紀の生命科学革命は、ゲノム解析、構造生物学、再生医療、ゲノム編集技術の 4 つにある。ゲノム解析革命は次世代シーケンサー (NGS) の発明により実現された。初代の NGS であった 454 社のシーケンサーは、パイロシーケンスを並列化したものである。パイロシーケンス自体の解析能力は限られているが、多数のサンプルを同時に解析することで、大規模なシーケンス解析を可能にしている。454 社のシーケンサーは Illumina 社のシーケンサーにより駆逐されたが、その主な理由は同時に解析できるサンプル数の違いによるものであった。膨大なサンプルの解析が可能になったのは、高分解、高感度の光学素子の開発によるものである。構造生物学でも、回折データを CCD カメラで高感度に検出することが可能となり、X 線構造解析が容易になった。さらにクライオ電子顕微鏡で原子レベルでの構造解析も、Direct electron detector の開発により実現している。細胞生物学においても、蛍光分子と光学素子を備えた蛍光顕微鏡により高い時間空間分解能での高感度での解析が可能となっている。蒸気機関が産業革命を起こしたように、光学素子の開発が現在の生命科学革命の基盤となっている。

454 シーケンサーを開発した Jonathan Rothberg 博士は自分の子供の遺伝子検査が迅速に行われないことに不満を感じ、着想している。ヒトゲノム解析には日立中央研究所の神原博士が開発したキャピラリーシーケンサーの技術が貢献している。また、浜松ホトニクスが世界最先端の光学素子を開発していることも良く知られている。しかし、残念ながら、日本は NGS の開発では完全に取り残され、現在の生命科学研究の遅れの要因の 1 つとなっている。この理由は、Rothberg 博士のようなヒトゲノム解析に関する明確な Motivation が日本の社会に欠如していたことである。

2011 年にノンフィクション部門でピューリッツァー賞を受賞した “The Emperor of All Maladies” では、Mary Lasker がガン克服の重要性を世論に訴え、ガン研究の基盤を根本的に変革したことが書かれていた。COVID-19 のパンデミックは科学の真価が問われる資金石であり、mRNA ワクチンの開発などで大きく貢献している。しかし、残念ながら日本の科学の貢献は少ない。日本の未来を開拓するための科学の重要性を世論に訴え、国民の強い Motivation に基づいた支持を得ることが日本の科学の未来に重要であると考えている。

# 目次

(1) 巻頭言 「21 世紀における生命科学革命の源とその原動力」	
養王田 正文 (東京農工大学) .....	1
(2) ホットトピックス「自動化された薬物動態予測ワークフロー：創薬・開発プロセスへの適用」	
渡邊 怜子 (国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所 AI 健康・医薬研究センター バイオインフォマティクスプロジェクト) .....	3
(3) CBI 研究機構便り CBI 研究機構量子構造生命科学研究所キックオフシンポジウム報告	
上村みどり (帝人ファーマ株式会社) .....	5
(4) 講演会報告・予告 .....	9
(5) 委員会報告 .....	13
(6) お知らせー学会賞創設のお知らせー .....	16
(7) 編集後記 .....	17

Hot!!!

## TOPICS

～最新文献の紹介

「医薬品研究と ADMET」分野

## 自動化された薬物動態予測ワークフロー：創薬・開発プロセスへの適用

渡邊 怜子

国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所

AI 健康・医薬研究センター バイオインフォマティクスプロジェクト

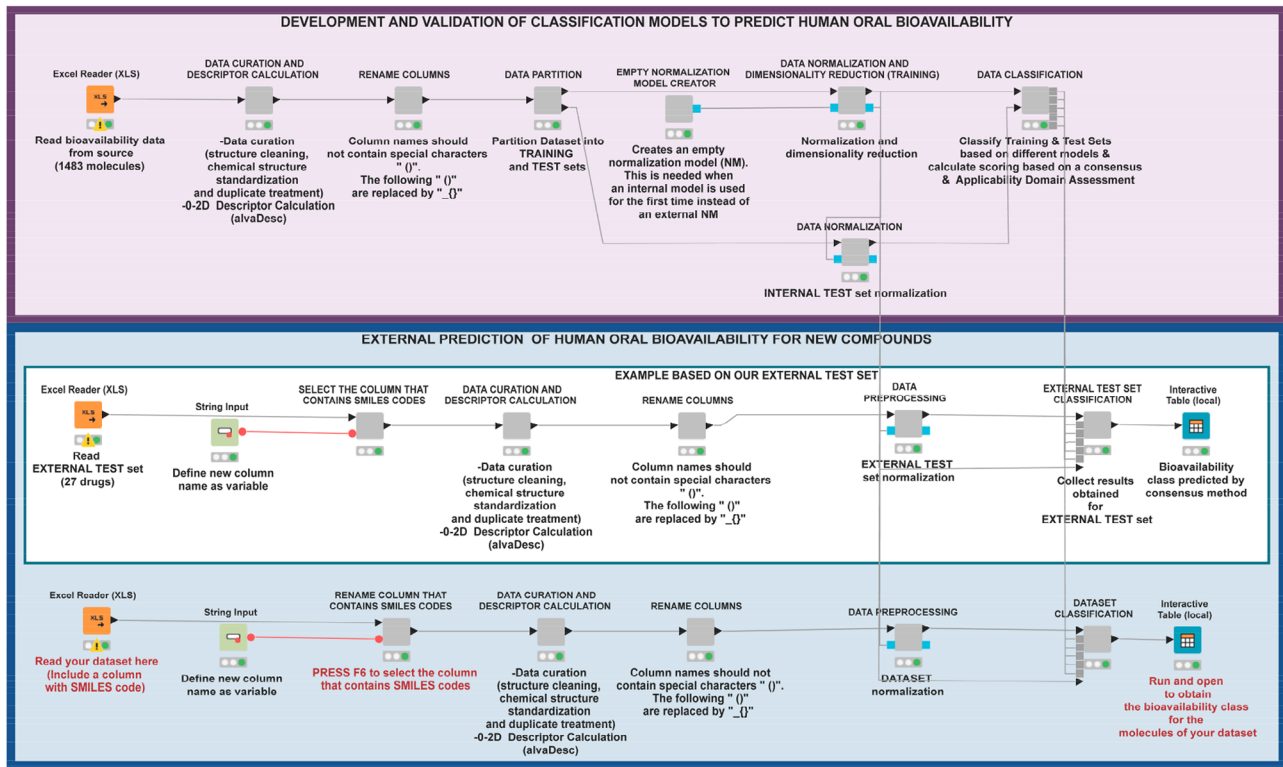
Falcón-Cano, G.; Molina, C.; Cabrera-Pérez, M. Á. ADME Prediction with KNIME: Development and Validation of a Publicly Available Workflow for the Prediction of Human Oral Bioavailability. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*, 2660–2667.

これまでの創薬開発において、比較的容易に発見できる創薬ターゲットはすでに網羅されており、がんやアルツハイマーといった疾患メカニズムが非常に複雑で開発が困難な領域が開発対象として残されている現状を背景として、近年、医薬品の開発費増加・生産性の低下が懸念されている。

豊富で高品質なデータを利用して意思決定や開発を支援する AI の導入は、この現状の打破に大きく貢献することが可能で、これまで人間の手で行ってきた過程を一気に加速することが期待されている。その一方で、ビッグデータからデータを抽出し創薬の場で活用するためには、創薬と IT 両方の横断的知識が必要で、人材の育成及び誰もが利用しやすい解析プラットフォームの開発などが求められている。

今回紹介する論文では、ヒトのバイオアベイラビリティを化学構造から予測するインシリコモデルを開発し、5つの機械学習アルゴリズムを組み合わせたアンサンブルモデルに基づいて、新薬および薬剤類似分子のヒトのバイオアベイラビリティを予測する KNIME 自動化ワークフローを報告している。ユーザーは、機械学習や統計モデリングに関する知識や高度な経験を必要とせずに予測結果を得ることができ、ワークフローは公開されており利用価値は大きい。

ワークフローには2つの主要セクションがある。1つ目は、QSPR (a semiautomated quantitative structure – property relationship) プロトコルの開発に関連するもので、データのキュレーション、記述子の計算、データの分割、正規化、次元の削減、アンサンブルモデルの構築、検証、適用領域の評価などが含まれている。2つ目は、1つ目のセクションで得られた分類モデルに基づいて、新規分子の予測を自動化するように設計されている。



原著 Figure2 より引用

"Reprinted ( "Adapted" or "in part" ) with permission from  
REFERENCE CITATION. Copyright YEAR American Chemical Society."

Gradient boosted trees や Naive bayes などの 5 種類の機械学習を用いて構築されたアンサンブルモデルのテストセットにおける各評価指標の平均値は、Balanced accuracy = 0.78, Sensitivity = 0.81, Specificity = 0.75, Area under the curve = 0.80 と良好な結果を示した。一方で false positive となった化合物の多くは、CYP や P-糖タンパク質の阻害剤や細胞間輸送やヌクレオシド輸送の基質であったことから、排出・代謝を説明可能な変数を含めることの重要性が示唆されている。

筆者らは、ユーザーが機械学習や統計モデリングに関する知識や高度な経験なしに予測結果を得ることが可能なことは大きな強みで、将来的には排泄や代謝関連の影響も考慮した自動化ワークフローを創薬の場で実用化していくとしている。

今回はバイオアベイラビリティに関する報告の事例であったが、その他の薬物動態パラメータに関する報告事例も増加していくと考えられる。誰もが利用可能なシステムが構築されることで、機械学習などの高度な知識や経験を持たない研究者にも AI 技術を創薬の場で実際に活用するための門戸が開かれ始めている。この成果が創薬の効率化に繋がることを期待している。

# CBI 研究機構便り

## 量子構造生命科学研究所 キックオフシンポジウム報告

CBI 研究機構 量子構造生物学研究所 所長

上村みどり（帝人ファーマ株式会社）

### 「Cryo-EM を基盤技術にしたベンチャー企業の創薬への視点」

～ CBI 研究機構 量子構造生命科学研究所 キックオフシンポジウム～

◆開催日：2021 年 5 月 14 日（金）9:00-12:00

◆オンライン開催（Zoom ミーティング）

#### ◆プログラム

1. Biortus 社 （9:05-9:50）

“Seeing is believing in drug discovery by cryo-EM”

Jack Yan (Executive Director of CryoEM Platform at Biortus)

2. 沖縄プロテイントモグラフィ株式会社 （9:50-10:35）

「単粒子解析からトモグラフィ解析まで、創薬への適応

～ 低分子医薬品から DDS、品質管理まで～」

亀井 朗（沖縄プロテイントモグラフィ社 CEO）

3. RIGAKU-JEOL MicroED （10:40-11:25）

「電子線回折（MicroED）統合プラットフォームによるナノ結晶の楽々構造解析」

奥西 栄治（日本電子株式会社）、神田 浩幸、山野 昭人（株式会社リガク）

4. 株式会社キュライオ （11:25-12:10）

「キュライオ電顕構造解析に基づくタンパク質の分子機構と創薬に向けて」

濡木 理（東京大学理学部・株式会社キュライオ社外取締役）





最初にコロナの変異株が猛威を振るう中、キックオフシンポジウムを開催できましたことを感謝いたします。当日は本シンポジウムのスポンサーである Biortus 社および事前のリハーサルを含め当日の進行を貴重なお時間を割きお手伝いいただきました CBI 若手の会有志、CBI 事務局の方々に深くお礼申し上げたいと思います。また、座長を快くお引きうけいただいた Thermo Fisher Japan の葦原雅道氏、大阪大学蛋白研所長 中川敦史先生にも深謝いたします。皆様方のサポートのおかげで CBI 学会員以外の方からも、オープンかつフリーに参加していただき、2021 年 5 月 14 日 9:00-12:10、上記シンポジウムオンラインで 151 名の参加者を数えました。

今回のシンポジウムは「Cryo-EM を基盤技術にしたベンチャー企業の創薬への視点」と銘打って、Cryo-EM 技術基盤をもってベンチャーを起業された 4 つの団体に、それぞれ各社の特徴的なビジネスモデルあるいはスピリットをお話いただきました。2017 年にノーベル化学賞に輝いた Cryo-EM はマシンの台数や、専門家数等で、米国、中国に大きく水をあけられましたが、日本においては文科省と AMED BINDS が中心となって補正予算をフル活用し、ハイエンドの Cryo-EM の実機導入につとめてまいりました。Cryo-EM ネットワーク等のしくみを立ち上げることで、日本においても膜タンパク質を中心に多くのすぐれた研究が実績として発表されるようになってまいりました。これまで、AMED BINDS PO として国際評価委員の制度等も AMED で最初に取り入れながら、日本のライフサイエンス分野の発展のため、誠心誠意かかわってまいりました。まだ台数では米国、中国には追いついてはおりませんが、日本におきましても、長年研究室で結晶化がうまくいわずに構造解析に至っていなかったお蔵入り同然のターゲットが次々と解析できているという現状において、新しいフェーズに入ったと考えております。

製薬企業におきましては、構造解析できたものをターゲットとするのではなく、真に薬を作りたいターゲットを構造解析する必要があり、タイミング的にも開発のスケジュールに合わせないといけないことと、やはり X 線のスループットの良さに比較して、まだすべての創薬ターゲットに本技術を適応するまではいまいし時間がかかると思いますが、外部のベンチャーを自社技術とを併用して上手に進めていくことがタイムリーに結果をだすためには求められる時代と思い、この企画をキックオフとして取り上げることいたしました。



最初に、上海に研究所があり本シンポジウムのスポンサーでもあり、CRO として実績のある Birtus 社の Cryo-EM プラットフォームの責任者の Jack Yan 氏に、“Seeing is believing in drug discovery by Cryo-EM” というタイトルでご講演いただいた。Yan 氏は、12 年間 UC San Diego で教鞭をとっており、Cryo-EM の専門家である。米国 Atea pharmaceutical Inc の経口剤であり、SARS-COV2 ウィルス RNA 依存性 RNA ポリメラーゼ (RdRp) 酵素への直接の阻害薬として開発中の、核酸ミミックのプロドラッグ AT-527 およびその進化型である Phase II にある AT-9010 の結合モードを Birtus 社で決定した内容のご講演であった。AT-527 はレムデシビル等の結合と同じように RdRp 活性部位に二分子が結合するが、一分子 (Mono-Phosphate) は共有結合、もう一分子 (Tri-phosphate) が非共有結合で結合していることがわかった。また、Di-Phosphate form の AT-9010 は AT-527 と異なり、NiRAN domain の Active site に非共有結合モードで結合しており、異なるメカニズムで阻害していることがわかった。本結果については、BioArchive に発表されており、Science 誌に掲載される。全体的な受注内容については、X 線解析に 7 割に対し、Cryo-EM は 3 割ほどだが、自身で電顕センターを保有し最上級機種も含む複数の Cryo-EM を保有しており、MicroED やトモグラフィーもビジネスモデルには含まれる。

沖縄プロテイントモグラフィー株式会社の亀井社長による発表は「単粒子解析からトモグラフィー解析まで、創薬への適応～低分子医薬品から DDS、品質管理まで～」というタイトルでご講演いただいた。Cryo-EM のブームが来る前の 2014 年に沖縄科学技術大学 (OIST) のスコグランド教授の開発したトモグラフィーと解析プログラム COMET を用いたビジネスで、いち早く、OIST 発ベンチャーとして同社を設立した。2019 年よりは、単粒子解析法も受託サービスも開始している。トモグラフィーを用いると、低分子に金コロイドをビオチン修飾することで、タンパク質のどこに結合しているかの情報をディテクトできるので、製薬企業の委託も多いとのことであった。

Rigaku-JEOL micro ED チームによるご講演は、「電子線回折 (MicroED) 統合プラットフォームによるナノ結晶の楽々構造解析」というタイトルで実施された。日本電子・リガク電子線回折統合プラットフォームは、①電子線回折用に最適化された透過型電子顕微鏡、②ハイブリッド型電子計数検出器、および③これらのコア技術を結合しシナジー効果を最大化するソフトウェア、電子線回折用 CrysAllisPro から成り立っている。電子線回折用 CrysAllisPro は、単結晶 X 線構造解析分野で定評のある CrysAlisPro をベースに、



電子線回折に特化したソフトウェアとして新たに開発された。測定・処理・自動構造解析の同時進行はもとより、CrysAlisPro の強みである困難な試料に対応するためのツールもそのまま利用することが可能とのことであり、単結晶 X 線回折システムを利用している研究者は、すぐに使いこなすことができる。後半は、ビデオでの実際の測定手法の説明があった。まだ X 線結晶解析と異なり、リファインメントにしても研究要素が大きい研究開発も含め実施していき、将来的には、CRO としての委託事業もするとのことであった。

最後のご講演は、東大の濡木先生であるが、今回は、ご自身で設立されたキュライオ社社外取締役のお立場として「クライオ電顕構造解析に基づくタンパク質の分子機構と創薬に向けて」というタイトルでお話いただいた。冒頭、通常学会では聞くことのできないベンチャー設立に対するライフサイエンス基礎研究を製品として国民に届けたいという熱い思いを聴くことができた。2019 年 8 月にクライオ電顕創薬ベンチャーキュライオを創立し、研究室と連動して創薬事業を開始しており、具体的なキュライオ社のプロジェクトは公開できないが、東大濡木研では 30 種以上の新規タンパク質の立体構造を単粒子解析で決定することに成功している。温度を感受する TRP チャネルに関しては、ナノディスクを用いて内在性の脂質が熱で解離することで、チャネルのゲートが開く分子機構が明らかにした。Eat-me シグナルであるフォスファチジルセリンを細胞膜表面から細胞質側に反転する P4 フリッパーゼに関しては、6 状態全ての輸送中間体の全構造を解くことに成功し、脂質輸送の分子機構が明らかされた。5 種の GPCR に関して、リガンドおよび共役する 3 量体 G タンパク質との複合体の構造を解明し、リガンド捕獲および G タンパク質活性化の動的機構を明らかにした。現在クライオ電子顕微鏡の単粒子解析の特長を活かし、タンパク質のダイナミクスから機能発現のメカニズム解明しこれを制御する薬剤の創出を目指している。キュライオ社においては、化合物を提案するまでのトータルな創薬研究の提供をビジネスモデルとしており、CRO 的なサービス提供はしないとのことではかの CRO 企業とは一線を画している。

終了後、いろいろな方面より、役に立ったとメールが入っており、今後もこのような斬新なカッティングエッジでシンポジウムを開催していきたいと考えている。同時に、当研究所の直下の研究会ではより積極的にプロジェクトベースで SBDD 基盤の研究開発を異分野連携および各組織を超越して実施していく予定であり、これらの課題解決に向かって挑戦したいメンバーを募集しているので、積極的にコンタクト (kamimura@cbi-society.org) いただくようお願いしたい。

# 講演会 報告・予告

## 第 420 回 CBI 学会 講演会

### 「創薬で活躍するオープンソースソフトウェア～開発から研究現場への普及まで～」

日時：2021 年 2 月 5 日（金）13:00 - 17:30

場所：オンライン配信（Zoom Meeting 利用）

世話人：大川 和史（旭化成ファーマ株式会社）、川上 智教（東レ株式会社）、三井 崇志（富士通株式会社）、村崎 広太（Meiji Seika ファルマ株式会社）

プログラム：

- (1) 13:00 - 13:10 はじめに
- (2) 13:10 - 14:05 「OSS による機械学習予測モデルパイプラインの構築および運用」  
山崎 広之（塩野義製薬株式会社）
- (3) 14:05 - 15:00 「KNIME を活用した創薬研究効率化の取り組み」  
下田 高央（旭化成ファーマ株式会社）
- (4) 15:10 - 16:05 「OSS を用いた 1 細胞オミックスデータ解析の現状と課題」  
露崎 弘毅（理化学研究所 生命機能科学研究センター）
- (5) 16:05 - 17:00 「GENESIS を用いた蛋白質-化合物結合自由エネルギー計算」  
李 秀栄（国立研究開発法人 医薬基盤・健康・栄養研究所）
- (6) 17:00 - 17:30 パネルディスカッション（OSS 活用のメリット） 司会：大川 和史

開催報告：

2021 年 2 月 5 日にオンライン開催した第 420 回 CBI 学会講演会について報告する。「創薬で活躍するオープンソースソフトウェア～開発から研究現場への普及まで～」と題し同分野で活躍されている 4 名の先生方にご講演頂いた。

最初の講師として山崎広之先生（塩野義製薬株式会社）からオープンソースソフトウェア（OSS）を利用した機械学習による化合物予測モデルパイプラインの構築および運用をご紹介いただいた。機械学習モデルでボトルネックとなりがちパラメータチューニングを OSS をうまく活用して効率よく行う事例など参考になる点が多かった。

下田高央先生（旭化成ファーマ株式会社）からは KNIME を活用したノンプログラマー且つユーザーという立場からの OSS との付き合い方に関して説明いただいた。先生はウェットの研究者として、フォーカスすべき解析タスクにリソースを割くために、KNIME というオープンソースワークフローツールを活用して、データの前処理や生データの加工を効率化すべきということを主張されていた。

露崎弘毅先生（理化学研究所 生命機能科学研究センター）からは「OSS を用いた 1 細胞オミックスデータ解析の現状と課題」と題して最先端の 1 細胞オミックスデータ解析の話題のみならず、データ解析の再現性問題への取り組みやオープンソースソフトウェアとの付き合い方に関するご講演頂き、OSS と商用ソフトウェアの目的に応じた使い分けが大切であるという主張をされていた。

李秀栄先生（医薬基盤・健康・栄養研究所）からは分子動力学計算のための OSS である GENESIS を用いた自由エネルギー計算について、自由エネルギー摂動法、拡張アンサンブル法との組み合わせを説明いただき、GENESIS

の現在の開発状況と創薬への応用例、さらに、コロナウイルス表面タンパク質の動的構造予測の最近の取り組みなど、基礎から応用まで幅広くご講演いただいた。

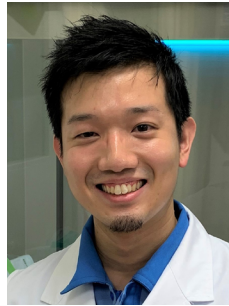
また、今回初めての取り組みとして、zoom のブレイクアウトルームセッションを利用した演者の先生とのグループディスカッションをおこなった。総勢 61 名が参加し、どのルームでも活発な議論がおこなわれた。

当日の参加者は 222 名であり、講演会は大盛況のうちに終了となりました。ご講演くださった先生方と、ご支援、サポートをくださった関係者の皆様に、改めて御礼を申し上げます。

(世話人一同)



山崎広之先生



下田嵩央先生



露崎弘毅先生



李秀栄先生

## 第 421 回 CBI 学会 講演会

### 「クライオ電子顕微鏡は創薬研究戦略を変えるか」

日時：2021 年 3 月 5 日（金）13:30 - 17:30

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー利用）

世話人：大槻 幸恵（大鵬薬品工業株式会社）、黒野 昌邦（小野薬品工業株式会社）、近田 千春（オープンアイ・ジャパン株式会社）、佐藤 秀行（シュレーディングー株式会社）

プログラム：

- (1) 13:30 - 13:35 開会の挨拶
- (2) 13:35 - 14:20 「クロマチン転写の Cryo-EM 解析  
～構造生物学のフロンティアとそれを支える技術基盤～」  
江原 晴彦（理化学研究所）
- (3) 14:20 - 15:05 「産業用酵素開発におけるクライオ電顕の活用  
～酵素を用いたオンサイトアミノ酸分析法の開発～」  
山口 浩輝（味の素株式会社）
- (4) 15:15 - 16:00 「Cryo-EM によって明らかになった動的な脂質輸送機構の解明と  
Cryo-EM を用いた創薬応用の可能性」  
平泉 将浩（田辺三菱製薬株式会社）
- (5) 16:00 - 16:45 「Modeling Ligands into Single Particle Cryo-EM Potentials」  
市原 収（シュレーディングー株式会社）
- (6) 16:55 - 17:25 パネルディスカッション
- (7) 17:25 - 17:30 閉会の挨拶

## 開催報告：

2021 年 3 月 5 日にオンライン開催した第 421 回 CBI 学会研究講演会について報告します。「クライオ電子顕微鏡は創薬研究戦略を変えるか」と題し、アカデミアと企業から計 4 名の講師にご講演頂きました。

江原晴彦先生（理化学研究所）からは、クライオ電子顕微鏡（Cryo-EM）単粒子解析により、RNA ポリメラーゼ II がヌクレオソームから DNA を段階的にはがしながら転写反応を行う一連の構造変化を捉え、転写伸長因子がヌクレオソーム転写を促進する分子メカニズムを解明したご研究についてご講演を頂きました。また、最新型のクライオ電子顕微鏡 Titan Krios G4 の導入により、より高品質なデータを大量に取得することが可能となる一方で、試料調製、グリッド作成、データ解析と IT インフラ整備などの測定以外の部分に課題があることを言及されました。

山口浩輝先生（味の素株式会社）からは、産業用酵素開発研究に関してのご研究成果をご講演頂きました。分岐鎖アミノ酸分析を目的としたオンサイトアミノ酸分析法に使用するロイシン脱水素酵素の産業上有用な耐熱化をご目的に、耐熱化機構解明に取り組まれました。X 線結晶構造解析では構造を解明出来なかったとのことですが、クライオ電子顕微鏡技術を適用することで、分解能 3.0 Å で立体構造を解明することが出来、研究に重要な基盤情報を得ることが出来たとのご報告を頂きました。

平泉将浩先生（田辺三菱製薬株式会社・東京大学）からは、Cryo-EM による単粒子解析法を用いて決定した複数の中間体構造から、P4-ATPase によるリン脂質輸送がイオン輸送型の P 型 ATPase とは大きく異なり、他の脂質輸送体にも見られない新規機構であることを解明した研究、また、Cryo-EM 解析例としては、小さい分子量である streptavidin(52.8kDa) を高解像度 (1.93 Å) で解析した事例についてお話いただきました。さらに、試料調整から構造解析まで数週間という短期間で実施できたことや、創薬標的を例にした最新の応用例をご紹介いただき、創薬応用への期待感がより高まりました。

市原収先生（シュレーディングー株式会社）からは、現状 cryo-EM 技術が抱える問題点の 1 つであるタンパク質に結合したリガンドの分解能の低さについて、計算化学的手法を用いてどう解決出来るかという観点でお話頂きました。具体的には、自社製品である GlideEM（Cryo-EM マップを元にリガンドドッキングを行うツール）と高精度力場である OPLS3e を用いたリファインメントを併用する事で、4 Å 程度の分解能のデータでも SBDD に有用なレベルまでリガンドの構造を最適化することができた事例をご紹介頂きました。

当日は、150 名以上の方にオンラインでご参加いただき、いずれの講演においても活発な質疑応答が行われ大盛況のうちに終わることができました。ご講演いただいた先生方、ご助力いただいた方々に、この場を借りて深く御礼申し上げます。

（世話人一同）



江原晴彦先生



山口浩輝先生



平泉将浩先生



市原収先生



## 今後の講演会 予定

詳細や申込み方法は CBI 学会ホームページ：講演会のページをご参照ください

[https://cbi-society.org/home/meeting\\_seminar.html](https://cbi-society.org/home/meeting_seminar.html)

### 第 424 回 CBI 学会講演会

#### 「プロテインノックダウン法による創薬パラダイムシフト」

日程：2021 年 6 月 25 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：丸岡 博（第一三共 RD ノバーレ株式会社）、岡田 興昌（田辺三菱製薬株式会社）、大原 康徳（日本たばこ産業株式会社）、狩野 敦（株式会社モルシス）

### 第 425 回 CBI 学会講演会

#### 「ヒト in vivo 薬物動態再構築の最前線：Middle-out approach の重要性を知る」

日程：2021 年 8 月 4 日（水）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：杉山 雄一（城西国際大学薬学部）、前田 和哉（北里大学薬学部）

### 第 426 回 CBI 学会講演会

#### 「日本版 AAAS が日本の科学を元気にする！

#### ～産学官民の交流が生み出す人と社会のダイナミズム～

日程：2021 年 8 月 27 日（金）

場所：オンライン配信（Zoom ウェビナー使用）

世話人：山崎 一人（アルゴレッジ）、六嶋 正知（塩野義製薬）、鶴田 宏樹（神戸大）

主催：CBI 学会関西部会

共催：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

# 委員会報告

## 創薬研究会運営委員会

---

### 第 46 回創薬研究会運営委員会

日時：2021 年 3 月 3 日 (水) 10:00-12:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題と討議事項

- (1) 担当者変更について
- (2) 2 月 5 日講演会ブレイクアウトルーム報告
- (3) CBI 研究機構 (量子構造生命化学研究所) より三次元構造解析企業の紹介
- (4) 今後の創薬研究会共通テーマ設定に関する討議
- (5) CBI 学会誌編集委員会からのお願い
- (6) グループ討議 (ブレイクアウトルーム)

## 関西部会運営委員会

---

日時：2021 年 3 月 17 日 (水) 10:00-11:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) 次回の講演会の開催について

- (2) 次々回の講演会の開催について
- (3) その次の講演会について
- (4) 次回運営委員会の予定

## 執行部会

---

### 第 67 回執行部会

日時：2021 年 2 月 25 日 (木) 18:00-19:45

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2021 年大会準備の進捗状況報告
- (2) 会計、事務局担当：令和 2 年度決算について、活動計算書に基づき説明
- (3) 渉外担当：他学会年会における他学会との共同セッションの提案について
- (4) 学会誌担当：第 9 巻 1 号公開について
- (5) 編集担当：投稿状況報告、海外非会員からの投稿料について
- (6) 若手の会：大会のセッションについて
- (7) 研究推進委員会：補助金の使い方について
- (8) 創薬研究会：今後の運営委員会、研究講演会の開催について
- (9) CBI 研究機構：創薬研究会での紹介、学会誌への掲載について
- (10) 事務局担当理事：新理事の決定について、事業年度変更について

## 第 68 回執行部会

日時：2021 年 3 月 19 日 (金) 18:45-19:55

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：プレナリー講演、招待講演の内容確定、企業出展ならびにスポンサードセッションについて
- (2) 渉外担当：第 2 回 TARA 国際シンポジウム (3/10) の紹介 (研究講演会にて)
- (3) 学会誌担当：第 9 巻第一号を発刊、新たなコラム担当者について
- (4) 編集担当：審査条件、審査料の検討
- (5) 地域担当：関西部会の運営委員会を開催、講演会の日程を決定
- (6) 若手の会：若手の会が主催する年次大会招待講演の内容について
- (7) 研究推進委員会：FMO 研究会、合同セミナーの報告、計算毒性学研究会での勉強会立ち上げについて
- (8) 創薬研究会：今後の進め方に関するグループディスカッションの検討
- (9) CBI 研究機構：量子構造生命科学研究所の参加企業とキックオフミーティングの開催について
- (10) 事務局担当理事：新規法人会員の報告
- (11) 学会賞：賞の種類、選考方法の検討

## 第 69 回執行部会

日時：2021 年 4 月 22 日 (木) 18:00- 19:20

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 年会担当：2021 大会セッションの決定と世話人のアサインについて、2021 大会のレセプション (懇親会) の実施について
- (2) 学会誌担当：若手の会主催の新規コラムについて
- (3) 編集担当：投稿の現状報告と分野長会議の開催報告
- (4) 事業担当：関東、関西以外の地域での活動展開について
- (5) 地域担当：関西部会で開催する研究講演会 (5 月 14 日、8 月 27 日) の内容報告
- (6) 若手の会：年次大会の招待講演決定と学会誌での活動の報告
- (7) 研究推進委員会：研究会の年間活動報告と若手の会の位置づけについて
- (8) 創薬研究会：ファシリテーターの選定とファシリテーターを中心とした活動の活性化策の検討
- (9) CBI 研究機構：キックオフミーティングの内容と約款作成について
- (10) 事務局担当理事：新規法人会員の報告と入会条件の検討、学会賞の規約と選定スケジュールについて
- (11) 選挙管理委員会：選挙スケジュールの決定

## CBI 研究機構

---

### 第 1 回運営会議

日時：2021 年 2 月 17 日 (木) 18:00- 18:40

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 会計年度の変更および「小口現金」について
- (2) 創薬研究会における Biortus 社の紹介および研究会開催について
- (3) CBI 研究機構の活動報告
- (4) CBI 学会として地方の掘り起こしについて

## 第 2 回運営会議

日時：2021 年 2 月 17 日 (木) 18:00- 18:40

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 専用メールアドレス作成の件
- (2) 創薬研究会における Biortus 社の紹介および研究会開催について
- (3) 各研究機構の活動報告

## 第 3 回運営会議

日時：2021 年 4 月 19 日 (月) 18:00- 18:40

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：報告および討議事項

- (1) 量子構造生物科学研究所 キックオフシンポジウム開催の準備状況について
- (2) 量子生物科学法人会員入会約款について
- (3) CBI 学会として地方の掘り起こしについて

## 2021 年大会プログラム委員会

---

### 第 2 回 2021 年大会プログラム委員会

日時：2021 年 5 月 18 日 (火) 15:00-17:00

場所：Zoom ミーティングによる遠隔会議

議題：(1) プログラム委員の名簿確認

- (2) 大会プログラム確認
- (3) フォーカストセッション、チュートリアルセッションについて
- (4) 口頭発表・ポスター発表の募集要項について
- (5) 口頭発表セッションについて
- (6) ポスターセッションについて
- (7) ポスター賞、口頭発表賞について
- (8) Remo 委員会での議論内容
- (9) 大会までのスケジュールについて





# お知らせ

CBI 学会では、化学と生物学の境界領域における計算機と情報学の応用（Chemo Bio Informatics）において著しい業績をあげ、Chem Bioinformatics の発展に貢献した方に対して CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞を授与いたします。

## 2021 年度 CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞 応募要領

### 【CBI 学会賞】

- ・ Chemo Bio Informatics の領域において、長年にわたり 顕著な業績をあげた CBI 学会員もしくは名誉会員。

### 【CBI 学会若手奨励賞】

- ・ Chemo Bio Informatics の領域において独創的で優れた研究を成し遂げ、将来の活躍が期待される CBI 学会員もしくは学生会員。ただし、2021 年 4 月 1 日において満 39 歳以下の方に限ります。

### 【授与人数】

CBI 学会賞 1 名、CBI 学会若手奨励賞 1 名、ただし、該当者がいない場合は、該当者なしといたします。

### 【提出書類】

1. 候補者の氏名、略歴
2. 推薦者氏名、推薦理由
3. これまでの研究業績
4. 主な論文一覧

上記書類を PDF ファイルにてお送りください（様式は問いません）。

### 【応募締め切り】

2021 年 6 月 30 日（水）必着。

### 【提出先】

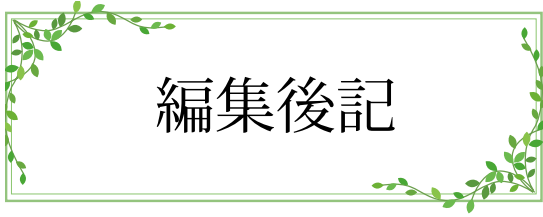
CBI 学会事務局 : [cbistaff@cbi-society.org](mailto:cbistaff@cbi-society.org)

CBI 学会賞、CBI 学会若手奨励賞は CBI 学会 2021 大会にて授与いたします。自薦、他薦を問いませんので、積極的なご応募をお願いいたします。

本件に関する質問等は、CBI 学会事務局までお問合せください。

### 【問い合わせ先】 CBI 学会事務局

[cbistaff@cbi-society.org](mailto:cbistaff@cbi-society.org)  
電話 : 03-6435-0458  
〒108-0023  
東京都港区芝浦 3-11-1  
キョウワクリエイティブ第一ビル 3 階



## 編集後記

本学会誌が新装されて 3 年目に入っています。これまで諸先生方にご協力頂いたお陰でより読み応えのある学会誌をご提供できてきたのではないかと自負しておりますが、近年ちょっと息切れがみで寄稿が少なくなってきました。この状況を改善するべく若手の会にご協力を仰ぎ、新たなコラムの開設に向けて動き出しております。現在、本学会誌では字数制限がなく自由な内容をご寄稿頂ける「ミニ特集」を始め、後進のために医薬誕生の経緯（裏話）を共有して頂く「医薬品誕生秘話」、研究講演会の内容をさらに広げ、フォローアップするための「もっと聞きたい知りたい話」など、随意受け付けております。皆様のご寄稿をお待ち申し上げます（Y.T.）。

---

## CBI 学会誌 第 9 卷 第 2 号

2021 年 6 月 1 日発行

CBI 学会誌編集委員会：水間 俊、高岡 雄司

制作：小澤 陽子 藤田 真澄 塩塚 真理 牛尾 律子 岸 早絵 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。

