

## 出会いの機会を創造する：HPの刷新

### 学会の当面の課題

- 現在のCBI学会の主な事業は、
- ・ほぼ月例の研究講演会の開催
  - ・年次大会の開催
  - ・学術誌CBI Journalの刊行
  - ・CBIに関連した人材の養成
  - ・研究開発

である。このうち最初の3つの事業はすでに軌道に  
いる。次の人材養成に関しては、まずCBI学会の関  
心領域をインターネット上で独習していけるサイトを  
精選したリンク集をCBI Digital T&L Materi-  
alsとして試作してHPにおいてみている。より本格  
的な人材養成をどう進めるかは、本年度もう少し具  
体的に取り組む予定でいる。研究開発はこれまで掲  
げてきたGrand Challenge構想の具体的な推進を  
めざして2つの研究会を立ち上げる準備をしている。

その第1は、Computer-aid drug discoveryの  
核心とも言うべき薬物受容体とリガンドとの結合の  
精密な解析を可能ならしめる大規模分子計算技法の  
応用を目的とした「計算化学研究会(仮称)」であり、  
第2は、Pathway/Networkを基盤とした疾病の理解  
や医薬品開発、医薬品の適正使用の研究をめざす  
「疾病経路網研究会(仮称)」である。これらの研究  
会は、3月19日と4月27日の研究講演会に合わ  
せてそれぞれ開催される打ち合わせ会をもって活動  
を開始する予定でいる。詳しいことは添付の企画案  
を参照されたい。

学会のもう一つのMissionは情報交換である。そ  
の中には上記のような活動を推進していくための案  
内も含まれているが、それ以外として会員に役立つ  
ような情報の提供や会員間のコミュニケーションが  
ある。伝統的な学会では、定期刊行物としての学会  
誌がこうした媒体として使われているが、こうした  
労力と費用の掛かる定期印刷物を刊行できないCBI  
学会では、ウェブサイトと電子メールを利用するの  
が現実的な解決策であろう。しかし実際にはこれと  
ても相当の人手と費用が掛かるため、事務局として  
もこれまではなかなか本格的に取り組むことがで  
きなかった。それでも今回多少新しい方向への努力を

始めることができるようになったので、以下これに  
ついて紹介する。

### HP刷新の基本概念

新しいウェブサイト構築  
の基本となる概念は、CBI学  
会の会員をふやし、出会い  
の機会を創造し、我が国に  
おける新薬開発と医薬品の  
適正な使用環境づくりを加  
速するために必要な情報を  
提供をすることである。こ  
こでの「出会い」とは、研究



CBI学会のホームページ

課題との出会いであり、人との出会いであり、職あ  
るいは仕事の機会との出会いであり、教育や学びの  
機会との出会いであり、研究開発に関連したSolu-  
tion(製品)やサービスとの出会いを意味する。

CBI学会自身の関心領域は情報と計算技法に限定  
されていたが、上記の研究開発に関連したSolution  
(製品)やサービスに関する情報提供ではこの制限を  
取り払っている。これは情報と計算技法が医薬品の  
研究開発の一部に過ぎず、これだけに話題を限定す  
るとdrug discovery全体の流れが見えにくくなる  
からである。さらにここでいう医薬品研究開発には、  
治験や上市後の追跡調査、適正使用までを含めてい  
る。これは治験を加速する必要性、患者の個人的な  
資質や状況を考慮した治療法Personalized  
Medicine、患者の価値観に基づく治療法の選択など  
への関心の高まり、という時代の流れを考慮してい  
るからである。一言で言えば、我々はこのサイトを、  
「医薬品開発Drug discoveryに関する日本語による  
最も信頼され利用される総合的なPortal」とするこ  
とをめざしているのである。

### Top Page

学会のホームページ(<http://www.cbi.or.jp/>)  
を開かれた方はTop Pageのデザインが一新されて  
いることに気づかれたであろう。新しいTop Page  
は、CBI学会への案内、現在の活動案内、Carrier

Up 支援、Nanotech, Bio, IT など CBI 学会の基盤となる科学技術への案内、Bio, Pharma, Medical IT の現状、さらに創薬 Drug Discovery に関する総合的な情報などに分かれています。このうち最後の 2 つの部分が現在構築中である。その他はだいたい試作内容が公開されている。

### Carrier Up 支援サイト (仮称)

このサイトは、CBI すなわち Cheminformatics (あるいは Chemoinformatics) や Bioinformatics に興味をもっている若手のための入門講座 CBI Digital T&L Materials や、それらを専攻できる大学院の案内、それらの技法の専門家がいる研究室など、「学ぶ機会」に関する情報が提供されている。また、求人求職欄も併設されている。こちらの求職欄は、大学などに所属されている会員が指導している学生や、期限付きで働いている PostDoc を含む若手研究者の利用を想定し、求人は法人賛助会員の研究者の採用を想定している。また、定年後の再就職をめざす研究者が利用されることも想定している。ただ、民間のビジネスとして定着しているいわゆる Head Hunting との競合は想定していない。

### BioPharmaMed IT

このページは、いわゆるバイオ、ライフサイエンス、医薬品開発、医療などへの IT Solution を紹介することを目的としている。CBI 学会が CBI 研究会として活動していた初期の頃は、研究講演会などで、このような IT Solution の紹介を積極的に行っていたが、近年そうした機会は少なくなってしまった。そのために IT Solution を提供している CBI 学会の法人賛助会員の方には、CBI 学会への参加の意義が多少変化してきているのではないかと考えられる。この頁は、こうした会員への便宜を計ることを考えており、法人会員の扱っている IT Solution を BioPharmaMed IT 全体の Context の中で紹介していただけるように工夫している。紹介の仕方に関しては、会員企業の担当者と対話しながら改善していくつもりである。

### Drug Discovery Site

これまで CBI 学会は、Drug Discovery の基盤と技法のうちでも、情報計算技法に焦点を合わせてきた。ただそれだけに話題を限定すると、Wet Lab を基盤とする Drug Discovery 全体の流れが見えにくく、時代の変化に取り残される怖れがでてきた。そこで新しい試みとして、Drug Discovery に関わる方法論を全体的な視点から整理し、そうした技法の

簡単な解説と Solution の提供者 Supplier に関する情報を掲載することとした。ここでも、現在の法人賛助会員が提供している Solution に関しては、Drug Discovery の方法論を近未来の視点から網羅的に紹介するという全体の精神とバランスを崩さないようにしながら、優先的に紹介するようにしたいと考えている。具体的な方法論については、事務局から法人賛助会員の担当者に、連絡する予定であるが、積極的な意見をお寄せいただくことをお待ちしております。

### 会員へのお願い

姿が見えないものに関して議論するのは難しい。とくに、レスポンスがあまりよくない CBI 学会の活動に関する会員への協力願いについてはなおのことである。そこで今回の HP の全面更新では、事務局が会長と相談しながらまず試作版を作成し、内容が固まってきたところで、役員や会員の協力をうることにした。現在のところは、やっと骨格が完成してきたという状況である。これからコンテンツとしての肉付けには、多くの方々の協力が必要である。この意味で会員各位が、新しい HP に関する積極的な意見を寄せてくださることを期待している。なお、事務局では 4 月末頃を新しい HP の一応の完成時期と予定している。

### Drug Discovery に関する最新情報

新しい HP の作成で最も重要と考えているのが、創薬の広場 Drug Discovery Site の一番上にある「最新情報」欄である。ここには Drug Discovery の最新情報、海外の Drug Discovery 関連雑誌の記事、CBI 学会の研究講演会での講演内容などのエッセンスをタイムリーにお知らせできればと考えている。そのためには、創薬の現場にいる研究者の協力がどうしても必要である。可能ならこの欄には編集委員会を設置し、そこには研究講演会の企画委員 (世話役) に参加していただけないかと考えている。

### 広告あるいは情報掲載依頼

今回の HP の刷新のもう一つの動機は、HP を魅力的なものにし、会員を含む多くの人々に日常的にアクセスしてもらえるようにし、そこに Solution/Service と利用者 Client/User との出会いの機会を積極的に創造することである。これに伴い広告あるいは情報掲載料としての収入増加も期待している。すでに何度もお知らせしているように、この数年、CBI 学会は活動が拡大されてきたことにより収支が赤字になっている。2003 年度は研究講演会の参加費

---

収入が予想より多くなり、赤字基調の収支のバランスは多少改善されたが、まだ十分とは言えない。HPに広告を入れることは本年度の最初から努力してみたが、これまでの結果は芳しいものではなかった。事務局としては、今回のHPの刷新により、有料の情報提供者を増やしたいと考えている。この点に関し、会員の協力をお願いできれば幸いである。

#### 制作担当者

今回のHPの刷新には、現在の事務局スタッフ全員が協力しているが、とくに小宮山直美、湯川真澄の

両氏に新しいコンテンツである Carrier Up 支援、BioPharmaMed IT、Drug Discovery の方法論と Solution 欄の作成を担当していただいている。そのため、とくに両氏からさまざまなお願いや依頼が直接会員にいくことが予想される。ご協力いただければ幸いである。

#### 連絡先

本件に関する問い合わせは、事務局 小宮山、湯川 (cbistaff@cbi.or.jp) となっている。

---

## Grand Challenge への再挑戦

Grand Challenge を掲げたのは 2000 年である。その構想の概要は HP で公開されているが、大規模分子計算を除くとなかなか参加者が名乗り出てくれないというのが実情である。この間にこの構想に関連した研究の進展も著しくなっている。そこで CBI 学会としては、とくに重要であり、すでにある程度の参加者が見込める実行可能な 2 つの課題に絞って、研究会の形で具体的な活動を開始することとした。以下は、それぞれの研究会の企画案である。関心のある方は、事務局 cbistaff@cbi.or.jp あるいはそれぞれの研究会の世話人に連絡されたい。

### 計算化学研究会 (案)

言うまでもなく計算化学は、Bioinformatics と並んで CBI 学会の基盤となる学問であり、研究講演会、年次大会、Journal においてもこのテーマは中心的なものとなっている。とくに「創薬」をテーマにする 2004 年の年次大会では、当然、創薬に関連した計算化学の話題が例年より多く寄せられると期待されている。

こうした研究交流とは別に CBI 学会では、Grand Challenge と呼ぶ研究開発事業としてタンパク質の計算を視野に入れた大規模計算の実現を支援してきた。具体的に応援してきたのは、北浦和夫博士によって理論的な基礎が確立され、同博士のチームと中野達也博士の協力でプログラム開発が進められてきた Fragment MO (FMO) 法である。CBI 学会において、こうした活動を先導、仲介、支援したのは CBI 学会の上林正巳理事 (産業技術総合研究所) である。幸い FMO は多くの研究者の関心を集め、方法論とプログラム開発の輪は大きく広がり、今ではこの研究開発活動の多くは CBI 学会とは無関係に展開されている。

こうした実用的な大規模計算の開発の状況の下で、CBI 学会事務局 (神沼) は、多田会長と相談しながら、

CBI 学会として計算化学に如何に取り組むべきかを模索してきた。例えば、CBI の 25 周年を記念した教育講座として「計算化学」を取り上げることも検討し、研究講演会 (第 236 回) でもこの話題を取り上げ、法人会員である製薬企業へのアンケートも試みた。この結果、製薬企業の計算化学への期待や取り組みにはかなりバラツキがあること、研究者が計算化学を使いこなすような教育講座に参加させる余裕のあるところは少ないこと、Virtual Screening の有効性は認めるものの Medicinal Chemist を脱帽させるようなリードのイメージをつくる技術としては物足らなさを感じていること、などの事実が見えてきた。また、製薬企業は多くのパッケージソフトを購入していること、クラスター計算機など大規模計算環境を整備している製薬企業研究所も少なくないことも見えてきた。

そこで CBI 学会として啓蒙や研究情報提供以上の研究開発事業の領域にあえて踏み込むとすれば、「創薬で実績のある Medicinal Chemist も瞠目する、あるいは脱帽するような In Silico Lead Generation Tool の開発」ではないかと考えるに到った。そのためには計算理論あるいは手法の研究者と創薬

現場にいる研究者との濃密な話合いと協力が不可欠である。そうした協力の出発点となる具体的な手法としてもっとも現実的なのはFMO法の実践活動であると思われるが、それだけにこだわらず、Medicinal Chemistの経験、勘、智慧、創造力を組み入れた新たな手法の開発が必要になるであろうと思われる。これを実践するためには、何か「研究会」のような組織を設けるのがよいであろう。

何事も実践してみないことには、ことのよし悪しは確認できない。そこで1月より、まずFMO法の基礎と応用に造詣の深い上林理事に、こうした研究会を先導していただけたら製薬企業を訪問してい

ただき、その結果を踏まえた話し合いの会(Workshop)を2004年3月19日(研究講演会に先立つ午前中)に開き、さらにこの研究会の設立を視野に入れた研究講演会を5-6月あたりに開催することを計画した。正式な研究会の設立の是非と形や事業内容は、これらの準備活動によって自然に決定されるであろう。

この事業案に関し、関心のある法人、個人の会員は、事務局の神沼(kaminuma@cbi.or.jp)あるいは上林理事(uebayasi@cbi.or.jp)まで連絡されたい。

## 疾病経路網研究会(案)

### はじめに

疾病経路網Pathway/Network to Disease研究は、遺伝子制御ネットワークGene Regulatory Network、細胞信号伝達経路Cell Signal Pathway、代謝マップMetabolic Mapなど、生体内の分子相互作用のPathwayやNetworkから疾病のメカニズムを理解し、その制御をめざすことを目的とする。Pathway/networkに関する知識の整理は、1980年代から構想されていたが、ヒトゲノムの解読やそれと関連した-omicsと呼ばれるゲノムワイドな計測技術の進歩などにより、急速に進んでいる。上記の3つのPathway/Networkのうち、もっとも知られているのが代謝マップであり、次に急速に明らかにされつつあるのが遺伝子制御ネットワークであり、関心が高まりながら解明が遅れているのが細胞信号伝達経路である。いずれにしても、いまや疾病メカニズムの解明も新しい医薬品の開発も、Pathway/Networkの知識を基礎としなければならない時代となった。そこでCBI学会では有志を募り、この課題を集中的に研究するための会を発足させることとした。

### 研究会の目的

研究講演会や非公式の情報交換を通じ、以下の作業を行う。

- (1) Pathway/Networkの基本的な調査研究
- (2) 疾患と医薬品に関するPathway/Networkの調査
- (3) Pathway/Networkに関する基礎研究
- (4) 実用化のための開発研究

### 成果の扱い

これらの作業の成果はできるだけウェブサイトに置き、この作業に参加した研究者間で共有し、一定の期間が過ぎたら公開することを基本方針とする。

### 他の学会などへの働きかけ

臨床医学系学会の他、日本医療情報学会、薬学会情報薬学研究部会などに対し本計画への参加、協力を打診する。

### 世話人あるいは幹事

この計画は現在、事務局担当理事の神沼と田中博理事(東京医科歯科大学)が、他の役員や会員有志と相談しながら進めている。正式な世話人あるいは幹事に関してはまだ決定されていない。

### 連絡先

本計画に関心のある方は、神沼(kaminuma@cbi.or.jp)または田中博理事(tanaka@cim.tmd.ac.jp)に連絡されたい。

## 「核内受容体研究から創薬へ」

体内性ホルモンの受容体である核内受容体 (NR) は、Structure-based drug design の好例として、すでに乳がん治療薬などを生み出してきたが、最近 Orphan Receptor と呼ばれ、リガンドが未知であった PPAR などのリガンドが相次いで発見され、肥満、糖尿病などいわゆる生活習慣病の治療薬の標的としても注目されるようになった。とくに、これまで機能が不明であった PPAR が脂肪燃焼のカギを握っていることも発見され、夢の抗肥満薬開発への期待も高まっている。一方、NR の標的遺伝子には、チトクローム P450 に代表される薬物代謝酵素や Transporter が多く含まれている。この意味で NR はすべての医薬品の効能や相互作用にも深く関係しており、創薬研究の普遍的な課題であることが認識され始めた。今回はこのような視点から、それぞれの話題で斯界の第一人者をお招きして、NR をめぐる話を伺うことにした。なお、この講演会は「Pathway/Network から疾病へ」というシリーズ講演会のひとつであり、世話人らが CBI 学会に提案している NR-SX と呼ばれる共同研究計画についても紹介する。

日時：2004年4月27日(火) 13:15 - 17:30

場所：日本化学会 化学会館 7F ホール

東京都千代田区神田駿河台 1-5 (JR お茶の水駅下車、徒歩 4 分)

世話人：神沼二真、田中博 (東京医科歯科大学)

### プログラム

1. 13:15 開催趣旨 創薬から見た核内受容体研究の意義  
(世話人)
2. 13:30-14:30 「核内受容体研究の最近の進歩」  
加藤茂明 (東京大学 分子細胞生物学研究所)
3. 14:30-15:30 「アリルハイドロカーボン受容体研究の最近の進歩」  
藤井義明 (筑波大学 先端学際領域研究センター)  
15:30-16:00 休憩
4. 16:00-17:00 「脂肪酸燃焼センサー」PPAR 活性化による生活習慣病改善機構」  
酒井寿郎 (東京大学 LSBM システム生物医学ラボラトリー)
5. 17:00-17:30 総合討論：核内受容体に関わる研究、海外の動きと我が国の状況

### 講演会参加費：

法人賛助会員：無料

個人会員 (非営利)：無料

個人会員 (一般企業)：¥5,000

ビジター (非営利)：¥1,000

ビジター (一般企業)：¥10,000

出席を希望される方は事前に必ず事務局セミナー受付 seminar@cbi.or.jp に連絡してください。

連絡先：CBI 学会事務局 セミナー受付

〒158-0097 東京都世田谷区用賀 4-3-16 イイダビル 301

TEL：03-5491-5423

FAX：03-5491-5462

E-mail：seminar@cbi.or.jp

<http://www.cbi.or.jp/>

## 「Cytochrome P450の分子計算」

開催趣旨：昨年、ヒト cytochrome P450 (CYP) 2C9 の結晶構造が明らかにされた。これによって、CYP に対する本格的な計算構造生物学的アプローチがよいよ現実のものとなってきた。従来 CYP による薬物代謝の解析は主にリガンド・ベースに限定されていたが、今後は分子動力学法、分子軌道法、ホモロジーモデリング等を駆使した (タンパク質や溶媒環境も陽に考慮した) 「より現実的な」条件下でのタンパク質 - リガンド系の分子シミュレーションが可能となり、Structure-Based ADME/Tox と呼べる分野が発展していくことが期待される。CYP は CBI 学会の提唱する NR-SX (核内受容体 - シンドローム X) 計画においてもキー分子の一つとして位置づけられており、4月の第241回講演会でも一部議論される予定である。今回の第242回講演会では、CYPの分子計算の最前線で活躍しておられる内外の第一線の研究者の方々に講師にお迎えして現状をレビューしていただく場を企画した。創薬開発に携わる多くの研究者の参加を期待する。

日時：2004年5月19日(水) 13:00-17:30

場所：富士総合研究所 本社2階大会議室

東京都千代田区神田錦町3-1 <http://www.fuji-ric.co.jp/company/map/takebashi.html>

世話人：田中成典(東芝) 福澤 薫(富士総研)

### プログラム

1. 13:00-13:15

「はじめに」世話人

2. 13:15-14:15

「From Classical to Structure Based 3D QSAR of Anti-Fungal Compounds (P450阻害剤の古典的QSARから"Structure Based 3D QSAR"解析へ)」

中馬 寛(徳島大学薬学部)

3. 14:15-15:15

「Reaction Pathway for Camphor Hydroxylation by a Compound I Model of Cytochrome P450 (シトクロム P450によるカンファーの水酸化に関する反応経路に関する理論的研究)」

吉澤一成(九州大学先端物質化学研究所)

15:15-15:30 休憩

4. 15:30-16:15

「Prediction of P450-BM3 Substrate Binding and Activity (P450-BM3の基質結合性と活性の理論的予測)」

K. Anton Feenstra (Vrije Universiteit Amsterdam, Section of Molecular Toxicology, Department of Pharmacochimistry)

5. 16:15-16:40

「Bio-Scale Engine: Reaction Mechanism of Nitric Oxide Reductase Cytochrome P450nor from *Fusarium Oxysporum* (一酸化窒素還元酵素 Cytochrome P450nor の反応機構)」

塚本弘毅(産業技術総合研究所生命情報科学研究センター)

6. 16:40-17:10

「Mechanism of Drug Metabolism by CYP3A4: Epoxidation of Carbamazepine (CYP3A4による薬物代謝機構：特にカルバマゼピンエポキシ化について)」

畑 晶之(千葉大学大学院薬学研究院)

7. 17:10-17:30 総合討論

### 講演会参加費：

法人賛助会員：無料

個人会員(非営利)：無料                      個人会員(一般企業)：¥5,000

ビジター(非営利)：¥1,000                      ビジター(一般企業)：¥10,000

出席を希望される方は事前に必ず事務局セミナー受付 [seminar@cbi.or.jp](mailto:seminar@cbi.or.jp) に連絡してください。

連絡先：CBI学会事務局 セミナー受付

〒158-0097 東京都世田谷区用賀4-3-16 イイダビル301

TEL：03-5491-5423      FAX：03-5491-5462      E-mail：[seminar@cbi.or.jp](mailto:seminar@cbi.or.jp)      <http://www.cbi.or.jp/>