

平成 24 年度業績集

【英文原著】

1. Le Chang, Takeshi Ishikawa, Kazuo Kuwata, Shoji Takada. Protein-specific force derived from the fragment molecular orbital method can improve protein-ligand binding interactive. *Journal of Computational Chemistry* 34(14), 1251-1257, 2013 4.583
2. T. Ishikawa, R. R. Burri, Yuji O. Kamatari, S. Sakuraba, N. Matubayasi, A. Kitao, K. Kuwata. A theoretical study of the two binding modes between lysozyme and tri-NAG with an explicit solvent model based on the fragment molecular orbital method. *Physical chemistry chemical physics* 15, 3646-3654, 2013 3.573
3. K. Takemura, R. R. Burri, T. Ishikawa, T. Ishikura, S. Sakuraba, N. Matubayasi, K. Kuwata, A. Kitao. Free-energy analysis of lysozyme-triNAG binding modes with all-atom molecular dynamics simulation combined with the solution theory in the energy representation. *Chemical physics letters* 559, 94-98, 2013 2.337
4. Mashima Tsukasa, Nishikawa Fumiko, Kamatari Yuji, Fujiwara Hiromichi, Saimura Masayuki, Nagata Takashi, Kodaki Tsutomu, Nishiwaka Satoshi, Kuwata Kazuo, Katahira Masato. Anti-prion activity of an RNA aptamer and its structural basis. *Nucleic Acids Research* 41(2), 1355-1362, 2013 8.026
5. Takuya Okamoto, Takeshi Ishikawa, Yoshiyuki Koyano, Norifumi Yamamoto, Kazuo Kuwata, Masataka Nagaoka. A minimal implementation of the AMBER-PAICS interface for Ab initio FMO-QM/MM-MD simulation. *Bulletin of the Chemical Society of Japan* 86(2), 210-222, 2013 1.436
6. Yuji Kamatari, Yosuke Hayano, Kei-ichi Yamaguchi, Junji Hosokawa-Muto, *Kazuo Kuwata. Characterizing antiprion compounds based on their binding properties to prion proteins: Implications as medical chaperones. *Protein Science* 22(1), 22-34, 2013 2.798
7. Ishikawa Takeshi, Kuwata Kazuo. RI-MP2 Gradient Calculation of Large Molecules Using the Fragment Molecular Orbital Method. *Journal of Physical Chemistry Letters* 3(3), 375-379, 2012 6.213
8. Kazunori Yamada, Hiroko Koyama, Kyoji Hagiwara, Atsushi Ueda, Yutaka Sasaki, Shin-nosuke Kanesashi, Ryuki Ueno, Hironori K. Nakamura, Kazuo Kuwata, Kazufumi Shimizu, Masaaki Suzuki, Yoko Aida. Identification of a novel compound with antiviral activity against influenza A virus depending on PA subunit of viral RNA polymerase. *Microbes and Infection* 14(9), 740-747, 2012 3.101

【和文総説】

1. 桑田一夫：量子創薬—論理的形態制御学の原理—(Non-commutative Geometrical Drug Discovery —The Principle of Geometrical Regulation—) YAKUGAKU ZASSHI 132(8) 873-879 2012
2. 桑田一夫：寄稿「数式から物質へ、言語から現実へ」 「杉田玄白賞」のあゆみ～第 1 回から第 10 回までの記録～ p.28 2012 年 12 月

【国際学会一般公演・ポスター発表】

1. <ポスター発表>

Hiromi Kuwata, Hiroyoshi Soga, Maki Shirasaka, Yukiko Komai, Kazuo Kuwata :
HOME CARE OF CHILDREN WITH FOP (FIBRODYSPLASIA OSSIFICANS
PROGRESSIVA) The 4th Congress of the European Academy of Paediatric
Societies (EAPS) 2012 年 10 月 6 日-9 日 Istanbul,Turley

2. <口頭発表>

Tomoaki Takemura, Tomohiko Urushisaki, Yoko Araki, Kenji Ichihara, Kuwata
Kazuo : Basic study on the anti-influenza effects of Brazilian green propolis extracts
APIMONDIA APIMEDICA-APIQUALITY INTERNATIONAL FORUM 2012 年 10
月 22 日-25 日 Zhenjiang, China

3. <ポスター発表>

Yuji O. Kamatari, Yosuke Hayano, Keiichi Yamaguchi, Junji Hosokawa-Muto,
Kazuo Kuwata : Characterization of anti-prion compounds according to the binding
properties to the prion protein. The 26th Annual Symposium 8 月 5 日-8 日 San
Diego,USA

【国内学会・シンポジウムポスター発表】

1. 木村力、武藤淳二、浅見賢司、村井利昭、桑田一夫：抗プリオン化合物 GJP14 の類縁
体合成と活性評価 日本薬学会第 132 年会 2012 年 3 月 28 日～31 日 北海道大学

2. 桑田一夫：蛋白研セミナー『『蛋白質と過飽和』~Impacts of Supersaturation on Protein
Science~』（オーガナイザー） 6 月 18 日～19 日 大阪大学蛋白質研究所

3. 山口圭一：Estimation of ultrasonic power to induce the amyloid fibril formation of
prion protein 蛋白研セミナー『『蛋白質と過飽和』~Impacts of Supersaturation on
Protein Science~』 6 月 18 日～19 日 大阪大学蛋白質研究所

4. 桑田一夫：X線回折・NMR 融合アミロイド線維イメージング X-FEL 第 1 回会合 9
月 18 日-19 日 理化学研究所 播磨研究所 放射光科学総合研究センター

5. <ポスター発表>

山口圭一：ダブル pH ジャンプによるアミロイド線維のほぼ可逆的な構造変化の解析
日本生物物理学会 9月22日～24日 名古屋大学

6. 桑田一夫：Relaxation Matrix and Prion 蛋白研セミナー「International Workshop on Pharmaceutical NMR-Nucleic Acids and Prion Protein-」 10月30日 大阪大学 蛋白質研究所
7. 山口圭一、桑田一夫：プリオン蛋白質のアミロイド線維形成を促進する超音波パワーの評価 第5回タンパク質の異常凝集とその防御・修復機構に関する研究会 11月1日 京都大学原子炉実験所
8. 桑田一夫：メディカルシャペロンと抗プリオン物質の分類 「プリオン病及び遅発性ウイルス感染症に関する調査研究班」、「プリオン病のサーベイランスと感染予防に関する調査研究班」合同研究報告会 1月21日・22日 アルカディア市ヶ谷

【シンポジウム等開催】

1. 桑田一夫：治療薬開発の最前線 再生医療と創薬の最前線 第1回シンポジウム「心臓外科と神経内科における難治性疾患の克服に向けて」 3月2日 岐阜大学サテライト キャンパス

【国内特別講演】

2. 桑田一夫：論理的創薬法の確立と抗プリオン化合物の創製 シーズ創製のための戦略的組織・人獣感染防御研究センター・臨床研究情報センター講演 2012年4月11日 臨床研究情報センター
3. 桑田一夫：自己複製する蛋白質‘プリオン’の制御 日本胎盤臨床研究会招待講演 2012年5月20日 東京ステーションコンファレンス
4. 桑田一夫：特殊及び一般形態形成理論・非可換外科学入門・慶應義塾大学講演 2012年5月26日 慶應義塾大学
5. 桑田一夫：プリオン蛋白質のコンフォメーションスイッチと核依存性複製機構 東京医科歯科大学特別講義 2012年6月19日 東京医科歯科大学
6. 桑田一夫：プリオン病新規治療薬 P092 の開発について プリオン病研修会 2013年

2月27日 ノーベルファーマ株式会社

7. 桑田一夫：論理的創薬から治験薬 GMP へ 第二回 岐阜構造生物学・医学・論理的創薬研究会シンポジウム 2013年3月21日 岐阜大学医学部

【報道】

1. 岐阜大 創薬へ新施設―異常プリオン難病治療法を試験 2013年1月18日中日新聞朝刊
2. 「ヤコブ病」新薬開発へ―岐阜大に研究施設開設 2013年1月24日岐阜新聞朝刊
3. 最新の研究成果紹介 難治性疾患克服 岐阜大でシンポ 2013年3月4日岐阜新聞朝刊
4. 再生医療の最前線伝える講演会 2013年3月3日 NHK 岐阜放送局