

構造活性フォーラム 2025

「AI・計算化学の産業応用と新展開」

主催： 日本薬学会構造活性相関部会

協賛： 情報計算化学生物学会（CBI 学会）

会期： 2025 年 6 月 20 日（金）

会場： Zoom によるオンライン開催

フォーラムホームページ： <https://sites.google.com/view/sarforum2025>

開催趣旨：製薬関連企業では、計算化学や機械学習を含む先端的なインシリコ技術の開発や応用が進められており、多くのノウハウが蓄積されている。これら産業界における計算化学・機械学習の研究動向を知ることは、薬学研究者が新たな着想を得るうえで重要である。そこで、本フォーラムでは産業界を中心とした最先端の応用研究をご紹介いただき、AI・計算化学の新たな切り口を議論したい。

プログラム：

講演1. 大川 和史（旭化成ファーマ）「AI と計算化学がもたらす新たな展望」

講演2. 半田 耕一（Axcelead Tokyo West Partners）「創薬における実践的な機械学習モデルの追求」

講演3. 準備中 キーワード：データ駆動型創薬、バーチャルスクリーニング、オープンサイエンス

講演4. 森 健一（アステラス製薬）「様々な創薬モダリティ研究を効率化するための AI 活用事例と展望」

講演5. 上原 彰太（塩野義製薬）「COVID-19 経口治療薬 S-217622(エンシトレルビル)創製における Virtual Screening の活用」

講演6. 小野 聡（ゼウレカ）「環状ペプチドのコンフォメーションと膜透過性」

講演7. 松尾 篤（中外製薬）「中分子創薬プラットフォームの技術開発、LUNA18 の創薬研究における計算化学・SBDD」

参加登録および申込締切日： 6 月 6 日（金）までに、フォーラムホームページから事前参加登録をお願いいたします。

参加費： 一般 4000 円、日本薬学会・協賛学会会員 2000 円、学生 無料

問合先：

構造活性フォーラム 2025 実行委員会

実行委員長 河合健太郎

〒573-0101 大阪府枚方市長尾峠町 45-1

摂南大学薬学部 医薬品化学研究室

Tel: 072-800-1235（直通）

