1. **Atsushi Ito, Keiichi Sudo, Satoru Kumazawa, Mami Kikuchi *and* Hiroshi Chuman :** Three-Dimensional Modeling of Cytochrome P450 14alpha-Demethylase (CYP51) and Interaction of Azole Fungicide Metconazole with CYP51 (Chapter 13), American Chemical Society, 2005.
2. **田中 秀治 :** 段階的流量比法/非相分離吸光光度検出による分配係数の測定, *分析化学,* **Vol.53,** *No.4,* 359-362, 2004年.
3. **浜田 道昭, 馮 誠, 稲垣 祐一郎, 長嶋 雲兵, 村上 和彰, 中馬 寛 :** 超高速計算環境での生体関連分子の活性·機能予測システムの構築:HIVプロテアーゼ阻害剤の解析への応用, *日本応用数理学会論文誌,* **Vol.14,** *No.4,* 267-288, 2004年.
4. **Hideji TANAKA *and* Takahiro Tachibana :** Determination of Acid/Base Dissociation Constants Based on a Rapid Detection of the Half Equivalence Point by Feedback-Based Flow Ratiometry, *Analytical Sciences,* **Vol.20,** *No.6,* 979-981, 2004.
5. **Yoshimitsu Nagao, Satoru Tanaka, Akiharu Ueki, Masunori Kumazawa, Satoru GOTO, Takashi Ooi, Shigeki Sano *and* Motoo Shiro :** New Ring-Expansion Reactions of Hydroxy Propenoyl Cyclic Compounds under Palladium(0)/Phosphine-Catalyzed Conditions, *Organic Letters,* **Vol.6,** *No.13,* 2133-2136, 2004.
6. **山内 あい子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, 後藤 尋規, 坂本 久美子, 中馬 寛 :** 医薬品安全性情報コミュニティの構築にむけて, *薬事,* **Vol.46,** *No.9,* 1675-1681, 2004年.
7. **Eiji Takeda, Junji Terao, Yutaka Nakaya, Ken-ichi Miyamoto, Yoshinobu Baba, Hiroshi Chuman, Ryuji Kaji, Tetsuro Ohmori *and* Kazuhito Rokutan :** Stress control and human nutrition, *The Journal of Medical Investigation : JMI,* **Vol.51,** *No.3-4,* 139-145, 2004.
8. **Hiroshi Chuman, Mori Atsushi, Hideji TANAKA, Yamagami Chisako *and* Toshio Fujita :** Analyses of the Partition Coefficient, Log P, using Ab Initio MO Parameter and Accessible Surface Area of Solute Molecules, *Journal of Pharmaceutical Sciences,* **Vol.93,** *No.11,* 2681-2697, 2004.
9. **Hideji TANAKA, Takahiro Tachibana, Risa Oda *and* Purnendu K. Dasgupta :** Determination of acid dissociation constants based on continuous titration by feedback-based flow ratiometry, *Talanta,* **Vol.64,** *No.5,* 1169-1174, 2004.
10. **Masahito Ochiai, Yoshio Nishi, Satoru GOTO *and* Hermann J. Frohn :** 1-Alkyl(aryl)(tetrafluoroborate)-λ3-bromanes as highly efficient Michael acceptors: Uncatalyzed conjugate addition of 1-alkynyl(trialkyl)stannanes yielding symmetrical and unsymmetrical 1,3-butadiynes, *Angewandte Chemie International Edition,* **Vol.44,** *No.3,* 406-409, 2005.
11. **Takashi Fujiwara, Yuki Hibino, Masaru Kihara, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** QSAR analysis for prediciton drug transfer into human breast milk, *The 10th Japan-Korea Joint Symposium on Drug Design and Development,* Tokushima, Apr. 2004.
12. **Daisuke Itokawa, Ryoma Murakami, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Physicochemical analyses of binding activity between cytochrome P450 and azole fungicides, *The 10th Japan-Korea Joint Symposium on Drug Design and Development,* Tokushima, Apr. 2004.
13. **Tatsusada Yoshida, Y Sato, Y Kadota, Y Hayashi, K Ito *and* Hiroshi Chuman :** Computational approach to binding of chymostatin analogue inhibitors with cathepsin A and its homologous enzymes, *Pharmaceutical Sciences World Congress (PSWC2004),* Kyoto, May 2004.
14. **Tatsusada Yoshida, Yurie Satoh, Yoshito Kadota, Yoshio Hayashi, Kohji Itoh *and* Hiroshi Chuman :** Computational approach to binding of chymostatin analogue inhibitors with cathepsin A and its homologous enzymes, *Pharmaceutical Sciences World Congress (PSWC2004),* Kyoto, May 2004.
15. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto, Hiroshi Chuman, Eiko Nakata Doolin, Mikio Sasaki *and* Hiroki Goto :** Construction of a drug safety information community for drug therapy in pregnancy, *Pharmaceutical Sciences World Congress (PSWC2004),* Kyoto, May 2004.
16. **Michiaki Hamada, Yuichiro Inagaki *and* Hiroshi Chuman :** Drug Discovery Using Grid Technology, *The 7th International Conference on High Performance Computing and Grid in Asia Pacific Region (HPC Asia 2004),* Saitama, Jul. 2004.
17. **Aiko Yamauchi, Eiko Nakata Doolin, Kumiko Sakamoto, Hiroki Goto, Mikio Sasaki *and* Hiroshi Chuman :** Construction of a drug safety information community in Japan, *7th International ISSX Meeting,* Vancouver, Aug. 2004.
18. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto, Hiroshi Chuman, Eiko Nakata Doolin *and* Mikio Sasaki :** Construction of a drug safety information system for pregnant women, *Pharmacy and Pharmaceutical Sciences World Congress 2004, 64th International Congress of FIP,* New Orleans, Sep. 2004.
19. **Michiaki Hamada, Yuichiro Inagaki *and* Hiroshi Chuman :** Drug Discovery Using Grid Technology, *The 15th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relaltionship & Molecular Modelling (Euro QSAR 2004),* Istanbul, Oct. 2004.
20. **Lepp Zsolt, Takashi Kinoshita *and* Hiroshi Chuman :** Virtual Screening Models for Lead Selection in Broad Therapeutic Areas, *MedChem Europe,* Praha, Feb. 2005.
21. **浜田 道昭, 稲垣 祐一郎, 中馬 寛 :** DrugMLとGrid創薬, *日本コンピュータ化学会 2004春季年会,* 2004年5月.
22. **中馬 寛 :** 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), *第242回CBI学会研究講演会,* 2004年5月.
23. **中馬 寛 :** 医薬品分子情報をコンピューターで扱うには, *JST·社会技術システムシンポジウム,* 2004年6月.
24. **日比野 有紀, 藤原 崇, 小林 進一, 坂本 久美子, 木原 勝, 山内 あい子, 中馬 寛 :** 薬物の胎盤通過性に関する情報化学的解析, *CBI学会 2004年大会,* 2004年7月.
25. **後藤 了, 小松 和志, 宗像 達夫, 堀 均, 寺田 弘 :** 分子の動きは超空間における「ヒモ」である: コンフォメーション空間多様体のパーコレーション解析, *分子構造総合討論会2004,* 2004年9月.
26. **宗像 達夫, 後藤 了, 藤本 照也, 加藤 裕子 :** アレルゲン活性糖鎖HPG- 2-N6アナログのコンフォメーション解析, *分子構造総合討論会2004,* 2004年9月.
27. **浜田 道昭, 稲垣 祐一郎, 中馬 寛 :** Grid技術とXMLデータベースを用いた創薬プラットフォームの構築とその応用, *第32回構造活性相関シンポジウム,* 2004年11月.
28. **糸川 大祐, 村上 良真, 山内 あい子, 中馬 寛 :** CYP2Bおよび3Aとアゾール系化合物との結合相互作用の解析, *第32回構造活性相関シンポジウム,* 2004年11月.
29. **吉田 達貞, 小田木 郷, 中馬 寛 :** HIV-1 protase とcyclic urea系化合物の相互作用解析とQSAR, *第32回構造活性相関シンポジウム,* 2004年11月.
30. **日比野 有紀, 藤原 崇, 小林 進一, 木原 勝, 坂本 久美子, 山内 あい子, 中馬 寛 :** 薬物の胎盤通過性と母乳移行性のQSAR解析-ClinicalQSAR(2), *第32回構造活性相関シンポジウム,* 2004年11月.
31. **Liu Xiangli, Hideji TANAKA *and* Hiroshi Chuman :** Quantitative structure-retention relationships on special RP-HPLC stationary phases used for lipophilicity measurement, *第32回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2004.
32. **Lepp Zsolt *and* Hiroshi Chuman :** Investigating the links between traditional QSAR approach and molecular level simulations of Papainligand binding., *第32回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2004.
33. **後藤 了, 小松 和志 :** 魚介類はしご状ポリエーテル毒素を探る脂環式構造の解析, *第58回形の科学シンポジウム,* 2004年11月.
34. **田中 秀治, Xiangli Liu, 川端 大地, 中馬 寛, 山上 知佐子 :** 段階的流量比法/非相分離吸光光度検出による揮発性物質の配分係数の測定, *第45回フローインジェクション分析講演会,* 2004年11月.
35. **田中 秀治, 馬場 勉 :** フィードバック制御および固定三角波制御を併用した流量比法によるハイスループット滴定, *第45回フローインジェクション分析講演会,* 2004年11月.
36. **Liu Xiangli, 田中 秀治, 中馬 寛 :** 疎水性評価を目的とした逆相高速液体クロマトグラフィーの構造-保持値の定量的相関解析, *第32回構造活性相関シンポジウム,* 2004年11月.
37. **白井 睦子, 木下 崇司, 中馬 寛, 寺尾 純二 :** 神経細胞モデルPC12培養細胞の酸化ストレスに対するケルセチン代謝物の作用, *第9回日本フードファクター学会(JSoFF),* 2004年12月.
38. **坂本 久美子, 神部 順子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, 後藤 尋規, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 医薬品安全性情報コミュニティの構築にむけた「妊娠と薬」に関する意識調査 -薬剤師,薬学生,研究者の場合-, *第27回 情報化学討論会,* 2004年12月.
39. **後藤 了 :** 分子の動きは超空間における''ヒモ''である ∼創薬設計への新しいアプローチ∼, *第5回バイオセミナー,* 2004年12月.
40. **木下 崇司, Lepp Zsolt, 河合 慶親, 寺尾 純二, 中馬 寛 :** 機能性食品設計のためのフラボノイドデータベース構築, *2006年度日本農芸化学大会,* 2005年2月.
41. **後藤 了, 小松 和志, 永澤 秀子, 藤田 智也, 中山 真一, 堀 均, 寺田 弘 :** パーコレーションクラスターを応用した環構造化合物の動的構造の解析, *日本薬学会第125年会,* 2005年3月.
42. **村井 健太郎, 多田 教浩, 末藤 孝志, 後藤 了, 落合 正仁 :** Bromonium Ylideの合成, *日本薬学会第125年会,* 2005年3月.
43. **田中 秀治, 嶋林 三郎 :** 「分散技術大全集」，第10章 分散状態の評価方法，第3節 粒度分布(分担), (株)情報機構 出版部, 東京, 2005年7月.
44. **Satoru GOTO, Mitsuhisa Sato, Umpei Nagashima, Hiroshi Chuman *and* et al :** Chapter 12. Drug Discovery Using Grid Technology, Elsevier, 2006.
45. **田中 秀治, 嶋林 三郎 :** 日本薬学会編 薬学教科書シリーズ第7巻 「製剤化のサイエンス」 第I部 製剤材料の性質，第2章 分散系，SBO-5 界面の性質，SBO-6 界面活性剤の性質と種類，SBO-7 乳剤の型と性質, 株式会社 東京化学同人, 東京, 2006年2月.
46. **田中 秀治, Xiangli Liu, Daichi Kawabata, 中馬 寛, Chisako Yamagami :** Application of a Stepwise Flow Ratiometry without Phase Separation to the Determination of the Chloroform/Water Distribution Coefficients of Volatile Diazines, *Chemical & Pharmaceutical Bulletin,* **Vol.53,** *No.4,* 374-377, 2005年.
47. **Zsolt Lepp *and* Hiroshi Chuman :** Connecting Traditional QSAR and Molecular Simulations of Papain Hydrolysis-Importance of Charge Transfer, *Bioorganic & Medicinal Chemistry,* **Vol.13,** *No.9,* 3093-3105, 2005.
48. **Hideji TANAKA *and* Tsutomu Baba :** High-Throughput Photometric Titrimetry Based on a Feedback-based and Subsequent Fixed Triangular Wave-controlled Flow Ratiometry, *Analytical Sciences,* **Vol.21,** *No.6,* 615-618, 2005.
49. **Hideji TANAKA *and* Arata Shogenji :** Determination of acid dissociation constants by feedback-based flow ratiometry constituted of ramp and hold modes, *Journal of Flow Injection Analysis,* **Vol.22,** *No.1,* 19-24, 2005.
50. **Takashi Kinoshita, Zsolt Lepp *and* Hiroshi Chuman :** Approach to novel functional foods for stress control 1.Toward structure-activity relationship and data mining of food compounds by chemoinformatics, *The Journal of Medical Investigation : JMI,* **Vol.52,** *No.Suppl,* 240-241, 2005.
51. **Kazuto Sato, Hiroshi Chuman *and* Seiichiro Ten-no :** Comparative Study on Solvation Free Energy Expressions in Reference Interaction Site Model Integral Equation Theory, *The Journal of Physical Chemistry B,* **Vol.109,** *No.36,* 17290-17295, 2005.
52. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto *and* Hiroshi Chuman :** Clinical QSAR study on the prediction of drug excretion into human breast milk, *Drug Metabolism Reviews,* **Vol.37,** *No.suppl2,* 330-331, 2005.
53. **Xiangli Liu, Hideji TANAKA, Aiko Yamauchi, Bernard Testa *and* Hiroshi Chuman :** Determination of lipophilicity by reversed-phase high-performance liquid chromatography: Influence of 1-octanol in the mobile phase, *Journal of Chromatography. A,* **Vol.1091,** *No.1-2,* 51-59, 2005.
54. **Hideji TANAKA *and* Tsutomu Baba :** High throughput continuous titration based on a flow ratiometry controlled with feedback-based variable triangular waves and subsequent fixed triangular waves, *Talanta,* **Vol.67,** *No.4,* 848-853, 2005.
55. **Shinji Amari, Masahiro Aizawa, Junwei Zhang, Kaori Fukuzawa, Yuji Mochizuki, Yoshio Iwasawa, Kotoko Nakata, Hiroshi Chuman *and* Tatsuya Nakano :** VISCAN: Visualized Cluster Analysis of Protein-Ligand Interaction Based on the ab initio Fragment Molecular Orbital Method for Virtual Ligand Screening, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.46,** *No.1,* 221-230, 2005.
56. **Takashi Kinoshita, Zsolt Lepp *and* Hiroshi Chuman :** Construction of a novel database for flavonoids, *The Journal of Medical Investigation : JMI,* **Vol.52,** *No.0,* 291-292, 2005.
57. **Liu Xiangli *and* Hiroshi Chuman :** Determination of solute lipophilicity by reversed-phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC), *The Journal of Medical Investigation : JMI,* **Vol.52,** *No.SUPPL,* 293-294, 2005.
58. **Lepp Zsolt, Kinoshita Takashi *and* Hiroshi Chuman :** Virtual screening models for finding novel antidepressants, *The Journal of Medical Investigation : JMI,* **Vol.52,** *No.SUPPL,* 297-299, 2005.
59. **Takashi Kinoshita, Lepp Zsolt, Yoshichika Kawai, Junji Terao *and* Hiroshi Chuman :** An Integrated Database of Flavonoids, *BioFactors,* **Vol.26,** *No.3,* 179-188, 2006.
60. **Zsolt Lepp, Kinoshita Takashi *and* Hiroshi Chuman :** Screening for New Antidepressant Leads of Multiple Activities by Support Vector Machines, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.46,** *No.1,* 158-167, 2006.
61. **AHMAD AMMAR GHAIBEH, Mikio Sasaki, Eiko Doolin Nakata, Kumiko Sakamoto, Hiroshi Chuman *and* Aiko Yamauchi :** Using computational intelligence methods in a web-based drug safety information community, *The First International Conference on Complex Medical Engineering-CME2005,* Takamatsu, May 2005.
62. **Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Data mining approach on clinical/pharmaceutical information accumulated in the drug safety information community, *The First International Conference on Complex Medical Engineering-CME2005,* Takamatsu, May 2005.
63. **Xiangli Liu *and* Hiroshi Chuman :** Determination of solute lipophilicity by reversed-phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC), *2005 COE International Conference on Biological Mechanism for Stress Control,* Tokushima, Aug. 2005.
64. **Takashi Kinoshita, Zsolt Lepp *and* Hiroshi Chuman :** The construction of a novel database for flavonoids, *2005 COE International Conference on Biological Mechanism for Stress Control,* Tokushima, Aug. 2005.
65. **Zsolt Lepp, Takashi Kinoshita *and* Hiroshi Chuman :** Virtual Screening Models for Finding Novel Antidepressants, *2005 COE International Conference on Biological Mechanism for Stress Control,* Tokushima, Aug. 2005.
66. **Hiroshi Chuman :** Fundamental, Structure Based and Clinical QSAR, *11th Asian Chemical Congress,* Seoul, Aug. 2005.
67. **Hiroshi Chuman :** Some Topics from Our research projects, *Asia Hub for e-Drug Discovery Workshop,* Seoul, Aug. 2005.
68. **Hitoshi Hori, Hideko Nagasawa, Yoshihiro Uto, Masamitsu Hiraoka, Keiko Goto, Hitomi Nakashima, Satoru GOTO *and* Shin-ichiro Masunaga :** Design, synthesis, and pharmacokinetics of hypoxic tumor-targeting boron carriers, *IMEBORON12,* Sendai, Sep. 2005.
69. **Hiroshi Chuman :** Fundamental, Structure Based and Clinical QSAR, *7,* Zhejiang, Sep. 2005.
70. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto *and* Hiroshi Chuman :** Clinical QSAR study on the prediction of drug excretion into human breast milk, *13th NA ISSX Meeting/20th JSSX Meeting,* Maui, Oct. 2005.
71. **Zsolt Lepp, Tatsusada Yoshida, Satoshi Odagi *and* Hiroshi Chuman :** Connecting Traditional QSAR and Molecular Simulations - Structure Based Quantitative Structure-Activity Relationship of Papain and HIV-1-Protease Inhibitors, *Pacifichem 2005,* Honolulu, Dec. 2005.
72. **Hideji TANAKA :** High throughput titration based on a flow ratiomatry controlled with variable and fixed triangular waves, *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2005),* Honolulu, Dec. 2005.
73. **田中 秀治, 馬場 勉, 喜多川 歩 :** 完全自動ハイスループット滴定を目的とするFLOW RATIOMETRYの研究, *第6回長井長義記念シンポジウム,* 2005年7月.
74. **田中 秀治, 馬場 勉 :** ハイスループット光度滴定を目的とする可変および固定三角波制御flow ratiometry, *日本分析化学会第54年会,* 2005年9月.
75. **小林 進一, 坂本 久美子, Zsolt Lepp, 山内 あい子, 中馬 寛 :** Support Vector Machine を用いたヒトにおける薬物催奇形性予測の試み, *日本コンピュータ化学会2005秋季年会,* 2005年10月.
76. **田中 秀治, 馬場 勉, 喜多川 歩 :** Flow ratiometryによる光度滴定, *第46回フローインジェクション分析講演会,* 2005年10月.
77. **Zsolt Lepp, 中馬 寛 :** Linking Molecular Simulations and Classical QSAR Analysis of Protein-ligand Complexes, *日本コンピュータ化学会2005秋季年会,* 2005年10月.
78. **坂本 久美子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, ガイベ アハマド アンマール, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 医薬品安全性情報コミュニティの構築-薬物催奇形性情報の共有に向けて-, *日本コンピュータ化学会2005秋季年会,* 2005年10月.
79. **日比野 有紀, 坂本 久美子, 小林 進一, 木原 勝, 中馬 寛, 山内 あい子 :** QSARによるヒトにおける薬物の胎盤通過性と母乳移行性予測:Clinical QSARの試み, *日本コンピュータ化学会2005秋季年会,* 2005年10月.
80. **吉田 達貞, 中馬 寛 :** ACE-阻害薬複合体の分子軌道法による相互作用解析, *日本コンピュータ化学会2005秋季年会,* 2005年10月.
81. **小田木 郷, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** HIV-1 Proteaseと環状尿素系阻害薬の分子軌道法による相互作用解析(3), *第33回構造活性相関シンポジウム,* 2005年11月.
82. **糸川 大祐, 村上 良真, 西岡 大貴, 福島 淳冶, 山内 あい子, 中馬 寛 :** CYP2B, 3Aおよび51とアゾール系化合物との結合相互作用の解析, *第33回構造活性相関シンポジウム,* 2005年11月.
83. **日比野 有紀, 坂本 久美子, 小林 進一, 木原 勝, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 薬物の胎盤通過性と母乳移行性予測-ClinicalQSAR (3), *第33回構造活性相関シンポジウム,* 2005年11月.
84. **小林 進一, 坂本 久美子, 山内 あい子, 中馬 寛 :** Support Vector Machine 手法に基づく薬物催奇形性リスク予測の試み, *第33回構造活性相関シンポジウム,* 2005年11月.
85. **Xiangli Liu, 田中 秀治, 山内 あい子, Bernard Testa, 中馬 寛 :** Determination of lipophilicity by reversed-phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC), *第33回構造活性相関シンポジウム,* 2005年11月.
86. **Lepp Zsolt, 木下 崇司 *and* Hiroshi Chuman :** Screening for New Antidepressant Leads of Multiple Activities by Support Vector Machines, *第33回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2005.
87. **川和田 美里, 山岸 賢司, 寺前 裕之, 中馬 寛, 常盤 広明 :** HIV-1PR阻害薬のファーマコファアに関する理論的研究, *第24回メディシナルケミストリーシンポジウム,* 2005年11月.
88. **木下 崇司, Lepp Zsolt, 河合 慶親, 寺尾 純二, 中馬 寛 :** 機能性食品設計のためのフラボノイドデータベース構築, *2006年度日本農芸化学大会,* 2006年3月.
89. **小林 進一, 坂本 久美子, Lepp Zsolt, 山内 あい子, 中馬 寛 :** パターン認識手法による薬物の胎児毒性予測の試み, *日本薬学会第126年会,* 2006年3月.
90. **AHMAD AMMAR GHAIBEH, Mikio Sasaki, Doolin Eiko Nakata, Kumiko Sakamoto, Hiroshi Chuman *and* Aiko Yamauchi :** Using computational intelligence methods in a web-based drug safety information community, in "Complex Medical Engineering", Springer-Verlag, Tokyo, Jan. 2007.
91. **Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Data mining approach on clinical/pharmaceutical information accumulatedin the drug safety information community, in "Complex Medical Engineering", Springer-Verlag, Tokyo, Jan. 2007.
92. **山内 あい子, 坂本 久美子, 日比野 有紀, 中馬 寛, 苛原 稔 :** 妊娠期の薬物療法∼その実態と母児への影響∼, *性差と医療,* **Vol.3,** *No.5,* 27(521)-32(526), 2006年.
93. **Tatsusada Yoshida, Zsolt Lepp, Kadota Yoshito, Satoh Yurie, Itoh Kohji *and* Hiroshi Chuman :** Comparative Analysis of Binding Energy of Chymostatin with Human Cathepsin A and Its Homologous Proteins by Molecular Orbital Calculation, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.46,** *No.5,* 2093-2103, 2006.
94. **坂本 久美子, 神部 順子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 「妊娠と薬」に関する意識調査-薬剤師, 薬学生, 研究者の場合, *医療薬学,* **Vol.32,** *No.9,* 956-963, 2006年.
95. **Mutsuko Shirai, Yoshichika Kawai, Rintaro Yamanishi, Takashi KInoshita, Hiroshi Chuman *and* Junji Terao :** Effect of a conjugated quercetin metabolite, quercetin 3-glucuronide, on lipid hydroperoxide-dependent formation of reactive oxygen species in differentiated PC-12 cells, *Free Radical Research,* **Vol.40,** *No.10,* 1047-1053, 2006.
96. **Daisuke Itokawa, Tomoki Nishioka, Junji Fukushima, Tomoyo Yasuda, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Quantitative structure - activity relationship study of binding affinity of azole compounds with CYP2B and CYP3A, *QSAR & Combinatorial Science,* **Vol.26,** *No.7,* 828-836, 2007.
97. **山内 あい子, 日比野 有紀, 坂本 久美子, 中馬 寛 :** 薬物の胎盤通過性と母乳移行性予測-Clinical QSAR, *SAR NEWS,* **Vol.10,** 11-14, 2006年.
98. **Kumiko Sakamoto, Eiko Nakata Doolin, Mikio Sasaki, ガイベ アハマド アンマール, 中馬 寛, 山内 あい子 :** A Web-Based Drug Safety Information Community, *CBI学会2006年大会,* 2006年7月.
99. **坂本 久美子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, ガイベ アハマド アンマール, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 医薬品安全性情報コミュニティにおける薬物催奇形性情報データベースの試験公開, *第16回 医療薬学会年会,* 2006年9月.
100. **山内 あい子, 坂本 久美子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, ガイベ アハマド アンマール, 中馬 寛 :** 医薬品安全性情報コミュニティの紹介, *第16回 医療薬学会年会,* 2006年9月.
101. **坂本 久美子, 中馬 寛, 山内 あい子, 谷 真琴, ガイベ アハマド アンマール, 佐々木 幹夫 :** 構造類似度算出機構(SimScore)を備えた薬物催奇形性情報システム, *SAR2006 第34回構造活性相関シンポジウム,* 2006年11月.
102. **糸川 大祐, 西岡 大貴, 福島 淳治, 安田 知世, 山内 あい子, 中馬 寛 :** アゾール系化合物のCYP2B/3Aとの結合および酵素活性阻害様式の解析, *SAR2006 第34回構造活性相関シンポジウム,* 2006年11月.
103. **谷 真琴, ガイベ アハマド アンマール, 佐々木 幹夫, 坂本 久美子, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 分子構造類似性に基く催奇形性予測ソフトウェア(Simscore), *SAR2006 第34回構造活性相関シンポジウム,* 2006年11月.
104. **山内 あい子, 坂本 久美子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, ガイベ アハマド アンマール, 中馬 寛 :** 医薬品安全性情報コミュニティ・データベースシステム:妊娠と薬に関する安全性情報の共有に向けて, *INFOPRO2006,* 2006年11月.
105. **坂本 久美子, 佐々木 幹夫, 中馬 寛, 山内 あい子 :** 医薬品安全性情報コミュニティサイトにようこそ!, *第23回徳島大学薬学部卒後教育公開講座,* 2006年12月.
106. **中馬 寛 :** 化学構造解析 赤外・ラマンスペクトル測定法, 株式会社 廣川書店, 東京, 2008年.
107. **Kumiko Sakamoto, Aiko Yamauchi, Mikio Sasaki *and* Hiroshi Chuman :** A structural similarity evaluation by SimScore in a teratogenicity information sharing system, *Journal of Computer Chemistry, Japan,* **Vol.6,** *No.2,* 117-122, 2007.
108. **山内 あい子, 坂本 久美子, 中田 栄子, 佐々木 幹夫, 谷 真琴, 中馬 寛 :** 医薬品安全性情報コミュニティ·データベースシステム:妊娠と薬に関する安全性情報の共有に向けて, *情報管理,* **Vol.50,** *No.3,* 135-143, 2007年.
109. **Masahito Ochiai, Kaneaki Takao, Norihiro Tada, Kazunori Miyamoto, Hiroshi Chuman, Shiro Motoo, Satoko Hayashi *and* Waro Nakanishi :** A New Type of Imido Group Donor: Synthesis and Characterization of Sulfonylimino-λ3-bromane that Acts as a Nitrenoid in the Aziridination of Olefins at Room Temperature under Metal-Free Conditions, *Journal of the American Chemical Society,* **Vol.129,** *No.43,* 12938-12939, 2007.
110. **Hiroshi Chuman :** Toward basic understanding of the partition coefficient log P and its application in QSAR, *SAR and QSAR in Environmental Research,* **Vol.19,** *No.1-2,* 71-79, 2008.
111. **Tatsusada Yoshida, Yamagishi Kenji *and* Hiroshi Chuman :** QSAR Study of Cyclic Urea Type HIV-1 PR Inhibitors Using Ab Initio MO Calculation of Their Complex Structures with HIV-1 PR, *QSAR & Combinatorial Science,* **Vol.27,** *No.6,* 694-703, 2008.
112. **Noriaki Okazaki, Ryoji Asano, Takashi Kinoshita *and* Hiroshi Chuman :** Simple computational models of type I / type II cells in Fas signaling-induced apoptosis, *Journal of Theoretical Biology,* **Vol.250,** *No.4,* 621-633, 2008.
113. **Hideki Uchimi, Kumiko Sakamoto, Makoto Tani, Mikio Sasaki, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Estimating potential risks of pharmaceuticals human fetuses by SimScore in a teratogenicity information sharing system, *Drug Metabolism Reviews,* **Vol.39,** *No.suppl1,* 207, 2007.
114. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto, Eiko Doolin Nakata, Makoto Tani, Mikio Sasaki *and* Hiroshi Chuman :** Constructing a web-based drug-teratogenicity information sharing system, anzen-drug com, *Drug Metabolism Reviews,* **Vol.39,** *No.suppl1,* 316, 2007.
115. **中馬 寛, 吉田 達貞 :** 分子科学計算・シミュレーションと定量的構造活性相関, *医療ジャーナル,* **Vol.43,** *No.10,* 2007年10月.
116. **Hiroshi Chuman *and* Noriaki Okazaki :** Link between Traditional QSAR and Molecular Simulation, *Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2007 (AHeDD2007),* Shanghai, Apr. 2007.
117. **Hiroshi Chuman :** Toward Basic Understanding of The Partition Coefficient Log P and Its Applications in QSAR, *Fourth International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Resources (CMTPI-2007),* Moscow, Sep. 2007.
118. **Hideki Uchimi, Kumiko Sakamoto, Makoto Tani, Mikio Sasaki, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Estimating potential risks of pharmaceuticals human fetuses by SimScore in a teratogenicity information sharing system, *8th INTERNATIONAL ISSX MEETING,* Sendai, Oct. 2007.
119. **Aiko Yamauchi, Kumiko Sakamoto, Eiko Doolin Nakata, Makoto Tani, Mikio Sasaki *and* Hiroshi Chuman :** Constructing a web-based drug-teratogenicity information sharing system, anzen-drug com, *8th INTERNATIONAL ISSX MEETING,* Sendai, Oct. 2007.
120. **Takashi Kinoshita, Zsolt Lepp, Yuko Shiba, Yoshichika Kawai, Junji Terao *and* Hiroshi Chuman :** Chemoinformatics and QSAR Study of Flavonoids, Tokyo, Dec. 2007.
121. **Noriaki Okazaki, Takashi Kinoshita *and* Hiroshi Chuman :** Model analysis of Fas signaling-induced apoptosis network by using the reaction network compiler React, Tokyo, Dec. 2007.
122. **Noriaki Okazaki, Takashi Kinoshita *and* Hiroshi Chuman :** Kinetic Analysis of Fas Signaling-Induced Apoptosis Network, *CBI学会2007年大会,* Oct. 2007.
123. **Tatsusada Yoshida, Kenji Yamagishi *and* Hiroshi Chuman :** QSAR Study of Cyclic Urea Type HIV-1 PR Inhibitors Using Ab Initio MO Calculation of Their Complex Structures with HIV-1PR, *CBI学会2007年大会,* Oct. 2007.
124. **Takashi Kinoshita, Zsolt Lepp, Yoshichika Kawai, Junji Terao *and* Hiroshi Chuman :** An Integrated Database of Flavonoides, *CBI学会2007年大会,* Oct. 2007.
125. **西岡 大貴, 近藤 崇泰, 寺尾 直也, 中馬 寛 :** チトクロームP450の基質および阻害剤選択性の情報科学的方法による予測, *第35回構造活性相関シンポジウム,* 2007年11月.
126. **糸川 大祐, 山内 あい子, 中馬 寛 :** アゾール系化合物のCYP2B/3Aとの結合および酵素活性阻害様式の解析 (2), *第35回構造活性相関シンポジウム,* 2007年11月.
127. **福島 淳治, 吉田 達貞, 橋爪 清華, 中馬 寛 :** 炭酸脱水酵素-ベンゼンスルホンアミド阻害剤複合体の非経験的分子軌道法を用いた相互作用解析とQSAR, *第35回構造活性相関シンポジウム,* 2007年11月.
128. **Yuko Shiba, Takashi Kinoshita, Hiroshi Chuman, Yutaka Taketani, Eiji Takeda, Yoji Kato, Michitaka Naito, Kyuichi Kawabata, Akari Ishisaka, Junji Terao *and* Yoshichika Kawai :** Flavonoids as Substrates and Inhibitors of Myeloperoxidase : Molecular Actions of Aglycone and Metabolites, *Chemical Research in Toxicology,* **Vol.21,** *No.8,* 1600-1609, 2008.
129. **Daisuke Itokawa, Aiko Yamauchi *and* Hiroshi Chuman :** Quantitative Structure-Activity Relationship for Inhibition of CYP2B6 and CYP3A4 by Azole Compounds - Comparison with Their Binding Affinity, *QSAR & Combinatorial Science,* **Vol.28,** *No.6-7,* 629-639, 2009.
130. **Tatsusada Yoshida, Fujita Toshio *and* Hiroshi Chuman :** Novel Quantitative Structure-Activity Studies of HIV-1 Protease Inhibitors of the Cyclic Urea Type Using Descriptors Derived from Molecular Dynamics and Molecular Orbital Calculations, *Current Computer-Aided Drug Design,* **Vol.5,** *No.1,* 38-55, 2009.
131. **Hiroshi Chuman *and* Tatsusada Yoshida :** QSAR Study of Cyclic Urea Type HIV-1 Protease Inhibitors Using Ab Initio MO Calculation of Their Complex Structures with HIV-1 Protease, *French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Strasbourg, ULP, Jun. 2008.
132. **Tatsusada Yoshida, Kazuya Nagaoka, Toshio Fujita *and* Hiroshi Chuman :** Reprofiling the HanschFujita Type of Classical QSAR Using Modern Molecular Calculations, *The 8th China-Japan Joint Symposium on Drug Design and Development,* Kobe, Nov. 2008.
133. **Kazuya Nagaoka, Miku Oonishi, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Theoretical Consideration on Enzymatic QSAR; Energy Decomposition Analysis of the Hammett Constant and QSAR of MMP-9 Inhibitors Using Ab Initio MO Calculations, *The 8th China-Japan Joint Symposium on Drug Design and Development,* Kobe, Nov. 2008.
134. **Hiroshi Chuman :** Links between QSAR and Molecular Simulation, *The Annual Meeting 2008 of Korean Society for Bioinformatics and Systems Biology,* Cheong-joo, Korea, Nov. 2008.
135. **Noriaki Okazaki *and* Hiroshi Chuman :** Positive Feedback of Caspase Activation as a Possible Mechanism of Life-Death Decision in Fas Signaling-Induced Apoptosis, *The 2008 Annual Conference of the Japanese Society for Bioinformatics (JSBi2008),* Osaka, Dec. 2008.
136. **吉田 達貞, 中馬 寛 :** QSAR Study of Cyclic Urea Type HIV-1 Protease Inhibitors Using Ab Initio Fragment MO Calculation of Their Complex Structures with HIV-1 Protease, *第36回構造活性相関シンポジウム,* 2008年10月.
137. **中馬 寛 :** 定量的構造活性相関と分子科学計算・シミュレーション, *JST-CREST/CBIシンポジウム「フラグメント分子軌道法-その基礎と応用-」,* 2008年10月.
138. **Seiji Hitaoka, Eri Kori, Yasushi Horikawa, Masahiro Taguchi, Tatsusada Yoshida, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Molecular Dynamics Study of the Effect of Arg344 Mutation on the Activation of Human Cathepsin A, *CBI2008,* Oct. 2008.
139. **Kazuya Nagaoka, Miku Oonishi, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** QSAR Study of Biphenyl Sulfonamide Type MMP-9 Inhibitors Using Ab Initio MO Calculation, *第36回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2008.
140. **Tatsusada Yoshida, Youhei Munei *and* Hiroshi Chuman :** Comparative QSAR Analyses of a Series of Benzene Sulfonamide Inhibitors Based on Ab Initio MO Calculation of Their Complex Structures with Carbonic Anhydrase, *第36回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2008.
141. **吉田 達貞, 中馬 寛 :** HIV-1プロテアーゼ-阻害剤複合体のフラグメント分子軌道法計算に基づくQSAR, *第4回「シミュレーション技術と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,* 2008年11月.
142. **中馬 寛, 吉田 達貞 :** HIV-1プロテアーゼ-阻害剤複合体の分子軌道法計算に基づくQSAR, *2007年度エミール研究会セミナー,* 2008年4月.
143. **長岡 和也, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 非経験的分子軌道法を用いた相互作用解析に基づく置換基の電子的効果の理論的考察, *第2回分子科学討論会,* 2008年9月.
144. **中馬 寛 :** 新しいQSARの構築を目指して, *2008年度 第2回CACフォーラムセミナー,* 2009年3月.
145. **中馬 寛 :** FMO法による亜鉛含有タンパク質阻害剤の定量的構造活性相関解析, *CREST-FMO 2009研究会,* 2009年3月.
146. **Tatsusada Yoshida, Y Kadota, S Hitaoka, E Kori, Yuta Horikawa, M Taguchi, Daisuke Tsuji, Mitsuyoshi Hirokawa, Hiroshi Chuman *and* Kouji Itou :** Expression and molecular dynamics studies on effect of amino acid substitutions at Arg344 in human cathepsin A on the protein local conformation., *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Proteins and Proteomics,* **Vol.1794,** *No.11,* 1693-1699, 2009.
147. **Seiichiro Ten-no, Jaewoon Jung, Hiroshi Chuman *and* Yukio Kawashima :** Assessment of Free Energy Expression in RISM Integral Equation Theory: Theoretical Prediction of Partition Coefficients Revisited., *Molecular Physics,* **Vol.108,** 327-332, 2010.
148. **中馬 寛, 吉田 達貞 :** 次世代創薬テクノロジー/実践:インシリコ創薬の最前線; QSAR研究の最前, *遺伝子医学MOOK, No.14,* 112-116, 2009年9月.
149. **Hiroshi Chuman, Toshio Fujita, Seiji Hitaoka, Eri Kori *and* Tatsusada Yoshida :** QSAR Study of Cyclic Urea Type HIV-1 Protease Inhibitors Using Ab Initio Fragment MO Calculation of Their Complex Structures with HIV-1 Protease, *CMTPI 2009 (Fifth International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Reseour),* Istanbul, Jul. 2009.
150. **Tatsusada Yoshida, Yohei Munei, Koji Hirozumi *and* Hiroshi Chuman :** Comparative QSAR Analysis of a Series of Benzene Sulfonamide Inhibitors Using Ab Initio Fragment MO Calculation of Their Complex Structures with Carbonic Anhydrase, *CMTPI 2009 (Fifth International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Reseour),* Istanbul, Jul. 2009.
151. **Seiji Hitaoka, Eri Kori, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Ab initio Fragment MO Study of Complexes between Influenza Neuraminidase-1 and Various Type of Sialic Acid Analogues, *The Second French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry 2009,* Nishinomiya, Nov. 2009.
152. **Seiji Hitaoka, Eri Kori, Masataka Harada, Yoshito Kadota, Yasushi Horikawa, Tatsusada Yoshida, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Expression and Molecular Dynamics Studies on Effect of Amino Acid Substitutions at Arg344 in Human Cathepsin A, *The Second French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry 2009,* Nishinomiya, Nov. 2009.
153. **Hiroshi Chuman :** Protein Inhibitors Using Full Ab Initio Molecular Orbital Calculations on Their Complex Structures with Protein, *CTDDR - 2010(Current Trends In Drug Discovery Research),* Lucknow, India, Feb. 2010.
154. **中馬 寛, 吉田 達貞 :** 非経験的フラグメント分子軌道法の定量的構造活性相関への応用, *シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築シンポジウム,* 2009年10月.
155. **Youhei Munei, Kazunori Shimamoto, Kouhei Okada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Comparative QSAR Analyses of a Series of Benzene Sulfonamide Inhibitors Based on Ab Initio Fragment MO Calculation of Their Complex Structures with Carbonic Anhydrase, *第37回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2009.
156. **Koji Hirozumi, Tatsusada Yoshida, Yoshichika Kawai, Junji Terao *and* Hiroshi Chuman :** QSAR of DPPH Activity of Flavonoids Based on Ab Initio MO Studies of Hydrogen Radical Abstraction of Phenols, *第37回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2009.
157. **Seiji Hitaoka, Eri Kori, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Ab initio Fragment MO Study of Complexes between Influenza Neuraminidase-1and Various Type of Sialic Acid Analogues, *第37回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2009.
158. **Eri Kori, Seiji Hitaoka, Masataka Harada, Yoshito Kadota, Yasushi Horikawa, Tatsusada Yoshida, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Expression and Molecular Dynamics Studies on Effect of Amino Acid Substitutions at Arg344 in Human Cathepsin A, *第37回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2009.
159. **Miho Shimizu, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Theoretical Study of Hammett Constants Based on ab initio MO Analysis of Intermolecular Interaction, *第37回構造活性相関シンポジウム,* Nov. 2009.
160. **Seiji Hitaoka, Eri Kori, Masataka Harada, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** Ab initio Fragment MO Study of Complexes between Influenza Neuraminidase-1and Various Type of Sialic Acid Analogues, *第37回構造活性相関シンポジウム,* 2009年11月.
161. **吉田 達貞, Yohei Munei, 中馬 寛 :** QSAR Studies Using Descriptors Derived from ab initio Fragment MO Calculation of Protein-Ligand Complex Structures, *第37回構造活性相関シンポジウム,* 2009年11月.
162. **中尾 允泰, 廣山 裕太, 吉田 達貞, 中馬 寛, 佐野 茂樹 :** N-メチルジケトピペラジン類のコンホメーション解析, *日本薬学会第130年会,* 2010年3月.
163. **中馬 寛 :** QSARの最前線, *平成21年度「生命情報科学技術者養成コース 創薬インフォマティクス特別講義(2)」,* 2009年8月.
164. **Tatsusada Yoshida, Yohei Munei, Seiji Hitaoka *and* Hiroshi Chuman :** Correlation Analyses on Binding Affinity of Substituted Benzenesulfonamides with Carbonic Anhydrase Using ab Initio MO Calculations on Their Complex Structures, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.50,** *No.5,* 850-860, 2010.
165. **Seiji Hitaoka, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Correlation Analyses on Binding Affinity of Sialic Acid Analogues with Influenza Virus Neuraminidase-1 Using ab Initio MO Calculations on Their Complex Structures, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.50,** *No.10,* 1796-1805, 2010.
166. **Yohei Munei, Kazunori Shimamoto, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Correlation analyses on binding affinity of substituted benzenesulfonamides with carbonic anhydrase using ab Initio MO calculations on their complex structures (II), *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters,* **Vol.21,** *No.1,* 141-144, 2011.
167. **Hiroshi Chuman :** "Toward a New Age of Quantitative Structure-Activity Relationship:Linear Expression by Representative Energy terms", *Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium (AHeDD)2010,* Seoul, Dec. 2010.
168. **Seiji Hitaoka, Masataka Harada, Eri Kori, Hiroshi Matoba, Satoshi Kitao, Rahman Md. Motiur, Tatsusada Yoshida, Daisuke Tsuji, Takatsugu Hirokawa, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Molecular Modeling of Human Neuraminidase-1 -Structure-Activity Relation of Sialic Acid Analogs against Neuraminidases as Validation of Modeling-, *Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium (AHeDD)2010,* Seoul, Dec. 2010.
169. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Eri Kori, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Correlation Analyses on Binding Affinity of Sialic Acid Analogues with Influenza Virus Neuraminidase-1 Using Ab Initio MO Calculations on Their Complex Structures, *Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium(AHeDD) 2010,* Seoul, Dec. 2010.
170. **Yohei Munei, Seiji Hitaoka, Kazunori Shimamoto, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** A Novel QSAR Procedure Using Full Ab Initio MO Calculations on Ligand-Protein Complexs: Carbonic Anhydrase with Substituted Benzenesulfonamides, *The Second Decennial Meeting between Seoul National University and the University of Tokushima,* Awaji, Dec. 2010.
171. **中馬 寛 :** Hansch-Fujita法の分子論的解釈と分子科学計算を用いたenzymatic QSAR, *構造活性フォーラム2010-QSARパラダイムの分化と深化,* 2010年6月.
172. **宗井 陽平, 島本 和典, 清水 美帆, 相原 薫, 山内 香子, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子科学計算に基づくベンゼンスルホンアミド誘導体の炭酸脱水酵素阻害機構解析と相関解析, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 22-23, 2010年10月.
173. **岡田 耕平, 山本 将博, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** CYPの基質および阻害剤選択性に関する統合解析-機械学習，ドッキング，QSAR-, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 60-63, 2010年10月.
174. **原田 政隆, 比多岡 清司, 郡 恵理, 的場 弘, 北尾 聡, Motiur Md.Rahman, 吉田 達貞, 辻 大輔, 広川 貴次, 伊藤 孝司, 中馬 寛 :** 分子モデリング・分子科学計算に基づくヒトノイラミニダーゼの構造-機能解析, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 70-71, 2010年10月.
175. **廣隅 公治, 馬島 彬, 吉田 達貞, 志葉 優子, 河合 慶親, 寺尾 純二, 中馬 寛 :** 非経験的分子軌道法によるフェノール水素原子のラジカル引き抜き反応の分子論的考察およびフラボノイドの構造活性相関への応用, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 72-74, 2010年10月.
176. **郡 恵理, 比多岡 清司, 原田 政隆, 的場 弘, 北尾 聡, Motiur Md. Rahman, 吉田 達貞, 門田 佳人, 辻 大輔, 広川 貴次, 伊藤 孝司, 中馬 寛 :** ヒトCathepsinA活性に対するArg344置換の影響に関する実験および分子科学計算に基づく解析, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 78-79, 2010年10月.
177. **清水 美帆, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 非経験的分子軌道法計算に基づく薬物―受容体分子間相互作用におけるHammett σの電子的効果の解析, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 92-93, 2010年10月.
178. **比多岡 清司, 的場 弘, 郡 恵理, 原田 政隆, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** インフルエンザノイラミニダーゼ-シアル酸誘導体複合体相互作用の非経験的フラグメント分子軌道法計算に基づく相関解析, *第38回構造活性相関シンポジウム,* 24-25, 2010年10月.
179. **中馬 寛 :** 薬をコンピューターでデザインする, *大学コンソーシアムやまがた産官学連携講演,* 2011年1月.
180. **中馬 寛 :** 計算創薬の基礎, *「企業を牽引する計算科学高度技術者の育成」第一回シミュレーションスクール,* 2010年10月.
181. **Tatsusada Yoshida, Koji Hirozumi, Masataka Harada, Seiji Hitaoka *and* Hiroshi Chuman :** Density Functional Theory Study of Hydrogen Atom Abstraction form a Series of para-Substituted Phenols: Why is the Hammett sigma p+ Constant Able to Represent Radical Reaction Rates?, *The Journal of Organic Chemistry,* **Vol.76,** *No.11,* 4564-4570, 2011.
182. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Masataka Harada, Tatsusada Yoshida, Takatsugu Hirokawa, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Correlation Analyses on Binding Affinity of Sialic Acid Analogues and Antiinfluenza Drugs with Human Neuraminidase Using ab Initio MO Calculations on Their Complex Structures - LERE-QSAR Analysis (IV), *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.51,** *No.10,* 2706-2716, 2011.
183. **Tatsusada Yoshida, Miho Shimizu, Masataka Harada, Seiji Hitaoka *and* Hiroshi Chuman :** Reassessment of Hammett sigma as an effective parameter representing intermolecular interaction energy - links between traditional and modern QSAR approaches, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters,* **Vol.22,** 124-128, 2012.
184. **Hiroshi Chuman :** Toward a New Age of Quantitative Structure-Activity Relationship: Linear Expression by Representative Energy Terms, *8th AFMC International Medicinal Chemistry Symposium (AIMECS11),* 8, Tokyo, Nov. 2011.
185. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Masataka Harada, Akihiro Kawano, Syuhei Sakamoto, Kohei Okada, Tatsusada Yoshida, Daisuke Tsuji, Tkatsugu Hirokawa, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative Energy Terms Analysis on Binding Affinity of Sialic Acid Analogues with Human Neuraminidase -LERE-QSAR (2), *The 4th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Fukuoka, Feb. 2012.
186. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Masataka Harada, Akihiro Kawano, Syuhei Sakamoto, Kohei Okada, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative Energy Terms Analysis on Binding Affinity of Sialic Acid Analogues with Influenza Virus Neuraminidase-1 -LERE-QSAR (1), *The 4th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Fukuoka, Mar. 2012.
187. **Hiroshi Chuman :** Links between Traditional and Modern QSAR Approaches - Linear Expression by Representative Energy (LERE) Terms, *The 4th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Fukuoka, Mar. 2012.
188. **Kaoru Aibra, Takuya Sugimoto, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Interpretation on Structural Transformation ofBACE-1 Inhibitors Using Fragment MolecularOrbital Calculations, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
189. **Miho Shimizu, Kasunori Shimamoto, Akira Mashima, Takuya Sugimoto, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative EnergyTerms Analysis on Hydrolysis of a Series ofSubstituted Phenyl Hippurates by Papain, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
190. **Kyoko Yamauchi, Miho Shimizu, Kaoru Aibara, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Molecular Calculations on Complexes of DHFRwith Substituted Triazines, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
191. **Hitaoka Seiji, Matoba Hiroshi, Kawano Akihiro, Sakamoto Syuhei, Okada Kohei, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative EnergyTerms Analysis on Binding Affinity of Sialic AcidAnalogues with Influenza Virus Neuraminidase-1- Why Does Tamiflu Have a Branched AlkoxySide Chain? -, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
192. **Hiroshi Matoba, Seiji Hitaoka, Masataka Harada, Akihiro Kawano, Syuhei Sakamoto, Kohei Okada, Tatsusada Yoshida, Hiroshi Chuman, Daisuke Tsuji, Takatsugu Hirokawa, Kouji Itou *and* Hiroshi Chuman :** Difference in Sensitivity of Antiinfluenza Drugs between Human and Influenza Neuraminidases, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
193. **Naruyuki Morioka, Seiji Hitaoka, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Computational Assessments of Binding Affinity ofDrugs in Clinical Use ? Carbonic Anhydrase II, *CBI(情報計算化学生物学会)/JSBi(日本バイオインフォマティクス学会)2011合同大会,* Nov. 2011.
194. **比多岡 清司, 的場 弘, 原田 政隆, 河野 明大, 坂本 修平, 岡田 耕平, 吉田 達貞, 辻 大輔, 広川 貴次, 伊藤 孝司, 中馬 寛 :** ヒトノイラミニダーゼ-シアル酸誘導体複合体相互作用の非経験的フラグメント分子軌道法計算に基づく相関解析 (LERE-QSAR), *第39回構造活性相関シンポジウム,* 15-16, 2011年11月.
195. **比多岡 清司, 的場 弘, 原田 政隆, 河野 明大, 坂本 修平, 岡田 耕平, 吉田 達貞, 辻 大輔, 広川 貴次, 伊藤 孝司, 中馬 寛 :** Why does tamiflu have a branched alkoxy side chain?, *第39回構造活性相関シンポジウム,* 39-40, 2011年11月.
196. **吉田 達貞, 廣隅 公治, 原田 政隆, 比多岡 清司, 中馬 寛 :** 古典QSAR解析におけるσp+の理論的解釈––密度半関数法分子軌道計算に基づくpara-置換フェノールの水素引き抜き反応に関する解析, *第39回構造活性相関シンポジウム,* 19-20, 2011年11月.
197. **Tatsusada Yoshida, Seiji Hitaoka, Akira Mashima, Takuya Sugimoto, Hiroshi Matoba *and* Hiroshi Chuman :** Combined QM/MM (ONIOM) and QSAR Approach to the Study of Complex Formation of Matrix Metalloproteinase-9 with a Series of Biphenylsulfonamides - LERE-QSAR Analysis (V), *The Journal of Physical Chemistry B,* **Vol.116,** *No.34,* 10283-10289, 2012.
198. **Seiji Hitaoka, Yuto Shibata, Hiroshi Matoba, Akihiro Kawano, Masataka Harada, Rahman Motiur M, Daisuke Tsuji, Takatsugu Hirokawa, Kouji Itou, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Modeling of Human Neuraminidase-1 and Its Validation by LERE-Correlation Analysis, *Chem-Bio Informatics Journal,* **Vol.13,** 30-40, 2013.
199. **比多岡 清司, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** ノイラミニダーゼ・阻害剤の結合相互エネルギーの非経験的分子軌道法計算による定量的構造活性相関解析(LERE-QSAR), *エミール研究会,* 2012年6月.
200. **Hiroshi Chuman :** New Staring Points toward Construction of Fundamental QSAR: Wonderful Gifts from Hansch and Fjita, *Hansch-藤田法50周年記念シンポジウム,* Aug. 2012.
201. **Hiroshi Chuman :** Development of a Novel QSAR using Molecular Calculations:Linear Expression by Representative Energy Terms, *生命医薬情報学連合大会,* Oct. 2012.
202. **Akira Mashima, Shuhei Sakamoto, Takuya Sugimoto, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** A Novel and Consistenet Approach to Enzymatic Reactions Using Ab Initio MO Calculations: Trypsin Catalysis of Series of Substrates, *生命医薬情報学連合大会,* Oct. 2012.
203. **Hiroshi Matoba, Seiji Hitaoka, Akihiro Kawano, Yuto Shibata, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** A Novel Fragment Based QSAR Using FMO and LERE: Binding Affinity of Relenza and Its Analogues with Influenza Virus Neuraminidase, *生命医薬情報学連合大会,* Oct. 2012.
204. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Akihiro Kawano, Yuto Shibata, Masataka Harada, Shuhei Sakamoto, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** A New Efficient Approch to Solvation Energy Change Associated with Complex Formation of Ligand with Protein: CriticalComparison of Various Solvation Energy Calculations, *生命医薬情報学連合大会,* Oct. 2012.
205. **Hiroshi Matoba, Seiji Hitaoka, Akihiro Kawano, Yuto Shibata, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 非経験的分子軌道法計算を用いたリレンザおよびその誘導体とインフルエンザ・ノイラミニダーゼとの結合自由エネルギー変化のQSAR解析-Fragment Based LERE-QSAR, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
206. **Kaoru Aibara, Kyoko Yamauchi, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** β‐セクレターゼ阻害剤のLead Evolution とOptimization:分子化学計算による薬物-タンパク質間相互作用から定量的考察, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
207. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Matoba, Akihiro Kawano, Yuto Shibata, Masataka Harada, Shuhei Sakamoto, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** リガンド-タンパク質の複合体形成に及ぼす溶媒効果の検討:LERE-QSAR解析における水和自由エネルギー項の定量的考察, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
208. **Kyoko Yamauchi, Kaoru Aibara, Shuhei Sakamoto, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** LERE-QSAR 解析によるbilinear model の新しい解釈:トリアジン誘導体とジヒドロ葉酸還元酵素との複合体形成, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
209. **Akira Mashima, Shuhei Sakamoto, Takuya Sugimoto, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** LERE-QSAR 解析の酵素触媒反応への適用:トリプシンによる置換馬尿酸フェニルの加水分解反応のミカエリス・メンテン定数および反応速度定数の定量的解析, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
210. **Takuya Sugimoto, Seiji Hitaoka, Akira Mashima, Hiroshi Matoba, Suhei Sakamoto, Kou Nonoshita, Takahisa Hayashi, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** A Combined QM/MM (ONIOM) and QSAR Approach to the Study of Complex Formation of Matrix Metalloproteinase-9 with a Series of Biphenylsulfonamides, *第40回構造活性相関シンポジウム,* 2012年11月.
211. **Seiji Hitaoka *and* Hiroshi Chuman :** Revisiting the Hansch-Fujita Approach and Development of a Fundamental QSAR, *Journal of Pesticide Science,* **Vol.38,** *No.2,* 60-67, 2013.
212. **Kunihiro Kitamura, Yunoshin Tamura, Tomokazu Ueki, Koji Ogata, Shigeho Noda, Ryutaro Himeno *and* Hiroshi Chuman :** Binding Free-Energy Calculation is a Powerful Tool for Drug Optimization - Calculation and Measurement of Binding Free Energy for 7-Azaindole Derivatives to Glycogen Synthase Kinase-3, *Journal of Chemical Information and Modeling,* **Vol.54,** *No.6,* 1653-1660, 2014.
213. **Tatsusada Yoshida, Akira Mashima, Katsunori Sasahara *and* Hiroshi Chuman :** A simple and efficient dispersion correction to the HartreeFock theory, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters,* **Vol.24,** *No.4,* 1037-1042, 2014.
214. **Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative Energy Terms: A Novel QSAR Precedure Using Theoretical Computations on Protein-Ligand Complexes, *CMTPI2013,* Seoul, Oct. 2013.
215. **Tatsusada Yoshida, Akira Mashima, Katsunori Sasahara, Yuto Shibata, Masahiro Eguchi, Seiji Hitaoka *and* Hiroshi Chuman :** Estimation of Non-covalent Interactions with a New Efficient Dispersion Corrected HF Approach, *CMTPI2013,* Seoul, Oct. 2013.
216. **Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative Energy Terms: a Novel QSAR Procedure Using Theoretical Computations on ProteinLigand Complexes, *International Symposium on Compound Design Technology,* Tokyo, Mar. 2014.
217. **Hiroshi Chuman :** Linear Expression by Representative Energy Terms: a Novel QSAR Procedure Using Theoretical Computations on ProteinLigand Complexes, *International Symposium on Compound Design Technology,* Osaka, Mar. 2014.
218. **中馬 寛 :** 自由エネルギー変化の代表エネルギー項による線形表現を用いた定量的構造活性相関解析の構築とその応用表現, *構造生物応用研究会,* 2013年5月.
219. **Motiur Md Rahman, Hirokawa Takatsugu, Daisuke Tsuji, Hitaoka Seiji, Tatsusada Yoshida, Hiroshi Chuman *and* Kouji Itou :** In vitro inhibitory and stabilizing effects of siastatin B toward human cytosolic sialidase 2 (NEU2), *第54回日本生化学会中国・四国支部例会,* May 2013.
220. **中馬 寛 :** 自由エネルギー変化の線形表現に基づくリガンド―タンパク質結合自由エネルギー変化の超精密予測, *構造活性相関フォーラム2013,* 2013年6月.
221. **中馬 寛 :** 大規模分子科学計算を用いる定量的構造活性相関;自由エネルギー変化の線形表現に基づくリガンド―タンパク質結合自由エネルギー変化の超精密予測, *天然ケミカルバイオロジー地区ミニシンポジウム,* 2013年9月.
222. **Motiur Md Rahman, Hirokawa Takatsugu, Daisuke Tsuji, Hitaoka Seiji, Tatsusada Yoshida, Hiroshi Chuman *and* Kouji Itou :** In vitro inhibitory and stabilizing effects of siastatin B toward human cytosolic sialidase 2 (NEU2), *第86回日本生化学会大会,* Sep. 2013.
223. **吉田 達貞, Akira Mashima, Katsunori Sasahara, 中馬 寛 :** Estimation of Non-covalent Interactions with a New Efficient Dispersion Corrected HF Approach, *生命医薬情報学連合大会(JSBi2013),* 2013年10月.
224. **Takahisa Hayashi, Takuya Sugimoto, Shuhei Sakamoto, Akihiro Kawano, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** Binding Mechanism of KNI-272 with HIV-1 Protease, *生命医薬情報学連合大会(JSBi2013),* 2013年10月.
225. **吉田 達貞, Koh Nonoshita, Takuya Sugimoto, Ayana Hamano, Akihiro Kawano, Shuhei Sakamot, 吉田 達貞 :** LERE-QSAR Analysis of Binding of -Lactum Hydroxamic Acid Derivatives with Tumor Necrosis Factor-Alpha Converting Enzyme, *生命医薬情報学連合大会(JSBi2013),* 2013年10月.
226. **吉田 達貞, Koh Nonoshita, Takuya Sugimoto, Ayana Hamano, Akihiro Kawano, Shuhei Sakamoto, 中馬 寛 :** LERE-QSAR Analysis of Binding of -Lactum Hydroxamic Acid Derivatives with Tumor Necrosis Factor-Alpha Converting Enzyme, *生命医薬情報学連合大会(JSBi2013),* 2013年10月.
227. **吉田 達貞, 馬島 彬, 笹原 克則, 芝田 雄登, 江口 将大, 比多岡 清司, 中馬 寛 :** LERE-QSAR解析の精密化とその検証, *第41回構造活性相関シンポジウム,* 2013年11月.
228. **杉本 拓弥, 野々下 航, 濱野 綾那, 林 敬久, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** ヒドロキサム酸系MMP阻害剤のLERE-QSAR解析, *第41回構造活性相関シンポジウ,* 2013年11月.
229. **河野 明大, 芝田 雄登, 林 敬久, 倉橋 昌大, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** LERE-QSAR解析による絶対立体配置の識別: インフルエンザ・ノイラミニダーゼとピロリジン系化合物との相互作用解析, *第41回構造活性相関シンポジウム,* 2013年11月.
230. **倉橋 昌大, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** セリンプロテアーゼ触媒反応のLERE-QSAR解析 トリプシンによる置換馬尿酸フェニルの加水分解反応機構, *第41回構造活性相関シンポジウム,* 2013年11月.
231. **坂本 修平, 笹原 克則, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子科学計算によるアゾール系化合物-ヒトCYP2B6複合体における相互作用解析に基づくLERE-QSAR解析, *第41回構造活性相関シンポジウム,* 2013年11月.
232. **Akira Mashima, Masahiro Kurahashi, Katsunori Sasahara, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Connecting Classical QSAR and LERE Analyses Using Modern Molecular Calculations, LERE-QSAR (VI): Hydrolysis of Substituted Hippuric Acid Phenyl Esters by Trypsin, *Molecular Informatics,* **Vol.33,** 802-814, 2014.
233. **Tatsusada Yoshida, Hayashi Takahisa, Mashima Akira, Sasahara Katsunori *and* Hiroshi Chuman :** A simple and efficient dispersion correction to the Hartree-Fock theory (3): A comprehensive performance comparison of HF-DtqwithMP2 and DFT-Ds, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters,* **Vol.26,** *No.2,* 589-593, 2015.
234. **Seiji Hitaoka, Hiroshi Chuman *and* kazunari Yoshizawa :** A QSAR Study on the Inhibition Mechanism of Matrix Metalloproteinase-12 by Arylsulfone Analogs Based on Molecular Orbital Calculations, *Organic & Biomolecular Chemistry,* **Vol.13,** *No.3,* 793-806, 2015.
235. **Hiroshi Chuman :** High Precision Prediction of Protein -Ligand BindingFree-Energy Change : Linear Expression by Representative Energy Terms, *5th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Strasbourg, Jun. 2014.
236. **Tatsusada Yoshida, Akira Mashima, Katsunori Sasahara *and* Hiroshi Chuman :** Estimation of Non-covalent Interactions with a New Efficient Dispersion Corrected HF Approach, *5th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,* Strasbourg, Jun. 2014.
237. **Hiroshi Chuman :** A New Era for Drug Discover: Revisitig Claddical QSAR and Seeking New Ones, *Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014 (AHeDD2014),* Chengdu, China, Nov. 2014.
238. **中馬 寛 :** 生体分子科学計算と定量的構造活性相関, *第41回生体分子討論会,* 2014年6月.
239. **吉田 達貞, 笹原 克則, 馬島 彬, 中馬 寛 :** 分子科学計算を用いたチオリダジンのCYP2D6による代謝過程の非経験的解析(Ⅰ), *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
240. **芝田 雄登, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 触媒反応機構に基づいたインフルエンザ・ノイラミニダーゼとシアル酸誘導体との相互作用解析, *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
241. **倉橋 昌大, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 馬尿酸フェニルエステルのシステインとセリンプロテアーゼの加水分解反応の分子化学計算による詳細解析(Ⅰ), *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
242. **林 敬久, 野脇 静, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子科学計算を用いたHIV-1 protease とアロフェニルノルスタチン骨格を持つ化合物との複合体の精密相互作用解析, *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
243. **吉田 達貞, 林 敬久, 倉橋 昌大, 馬島 彬, 笹原 克則, 中馬 寛 :** リガンド-タンパク質の複合体形成における分散力相互作用の検討:LERE-QSAR解析における結合相互作用エネルギー項の定量的評価, *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
244. **野々下 航, 濱野 綾那, 岸 優作, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 腫瘍壊死因子α変換酵素(TACE)とγ-ラクタムヒドロキサム酸誘導体のLIE法に基づく解析，LERE-QSAR解析と検証, *第42回構造活性相関シンポジウム,* 2014年11月.
245. **Katsunori Sasahara, Akira Mashima, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Molecular dynamics and density functional studies on the metabolic selectivity of antipsychotic thioridazine by cytochrome P450 2D6: Connection with crystallographic and metabolic results, *Bioorganic & Medicinal Chemistry,* **Vol.23,** *No.17,* 5459-5465, 2015.
246. **Tatsusada Yoshida, Takahisa Hayashi, Akira Mashima *and* Hiroshi Chuman :** A simple and efficient dispersion correction to the Hartree-Fock theory (2): Incorporation of a geometrical correction for the basis set superposition error, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters,* **Vol.25,** *No.19,* 4179-4184, 2015.
247. **Yunoshin Tamura, Hiroh Miyagawa, Tatsusada Yoshida *and* Hiroshi Chuman :** Binding interaction of SGLT with sugar and thiosugar by the molecular dynamics simulation, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes,* **Vol.1848,** *No.11,* 2799-2804, 2015.
248. **M Motiur Rahman, Takatsugu Hirokawa, Daisuke Tsuji, Jun Tsukimoto, Seiji Hitaoka, Tatsusada Yoshida, Hiroshi Chuman *and* Kohji Itoh :** Novel pH-dependent regulation of human cytosolic sialidase 2 (NEU2) activities by siastatin B and structural prediction of NEU2/siastatin B complex, *Biochemistry and Biophysics Reports,* **Vol.4,** 234-242, 2015.
249. **笹原 克則, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** Crystallographic Binding Poses and Metabolites of Antipsychotic Thioridazine by Cytochrome P450 2D6; LC-UV-MS/MS Analysis, Molecular Dynamics and Density Functional Calculations, *日本薬物動態学会第30回年会,* 2015年11月.
250. **吉田 達貞, 林 敬久, 倉橋 昌大, 馬島 彬, 笹原 克則, 中馬 寛 :** リガンド-タンパク質複合体の分散力相互作用 の検討: Hatree-Fock 理論に対する分散力補正, *分子シミュレーション討論会,* 2015年11月.
251. **笹原 克則, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子動力学法及び密度汎関数法を用いたCYP2D6 におけるチオリダジンの代謝機構の解明: 結晶結 合ポーズと代謝物の関係について, *分子シミュレーション討論会,* 2015年11月.
252. **倉橋 昌大, 馬島 彬, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** QM/MM (ONIOM) 法を用いたシステインプロテ アーゼによる馬尿酸フェニルエステル加水分解 反応の理論的考察, *分子シミュレーション討論会,* 2015年11月.
253. **馬島 彬, 倉橋 昌大, 西村 兆二朗, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子科学計算を用いた自由エネルギー変化の線 形則に基づくトリプシンの触媒反応メカニズム の詳細解析, *分子シミュレーション討論会,* 2015年11月.
254. **林 敬久, 福田 修平, 岡 尚生, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** 分子科学計算を用いた HIV-1 protease とアロフェ ニルノルスタチン骨格を持つ化合物との複合体 の精密相互作用解析, *分子シミュレーション討論会,* 2015年12月.
255. **濱野 綾那, 谷山 萌, 吉田 達貞, 中馬 寛 :** ヒストン脱アセチル化酵素 (HDAC) -ベンズア ミド系阻害剤複合体形成に関する結合自由エネ ルギー変化の非経験的分子軌道法に基づく相関 解析, *分子シミュレーション討論会,* 2015年12月.
256. **吉田 達貞 :** 理論・計算化学を基盤とした リガンド-タンパク質複合体の相互作用解析, *第2回若手教員講演会,* 2016年6月.
257. **吉田 達貞 :** 理論・計算化学を基軸とした 新しい定量的構造活性相関解析, *触媒開発への応用を目指したインフォマティックス研究会,* 2016年7月.
258. **岡 尚生, 谷山 萌, 吉田 達貞 :** FKBPとリガンドとの複合体形成に関する結合自由エネルギー変化の非経験的分子軌道法に基づく相関解析, *分子シミュレーション討論会,* 2016年11月.
259. **西村 兆二朗, 吉田 達貞 :** 密度汎関数理論およびドッキング計算に基づくCYP1A2におけるカフェインの代謝部位選択性の検討, *分子シミュレーション討論会,* 2016年11月.
260. **谷山 萌, 岡 尚生, 吉田 達貞 :** QM/MM法を用いたグリコーゲンシンターゼキナーゼ-3βと7-アザインドール誘導体の結合相互作用解析, *分子シミュレーション討論会,* 2016年11月.
261. **吉田 達貞, 岡 尚生, 谷山 萌, 西村 兆二朗 :** リガンド-タンパク質複合体の分散力相互作用の検討: Hartree-Fock理論に対する分散力補正 (2), *分子シミュレーション討論会,* 2016年11月.
262. **小暮 健太朗, 石川 みすず, 平井 将太, 濵 進, 細井 信造, 吉田 達貞, 山下 栄次, 髙橋 侑 :** ビタミンEとの相乗的抗酸化効果におけるアスタキサンチン立体構造の影響, *第70回日本酸化ストレス学会学術集会,* 2017年6月.
263. **石川 みすず, 平井 将太, 濱 進, 細井 信造, 吉田 達貞, 高橋 侑, 小暮 健太朗 :** 相乗的抗酸化効果を示すアスタキサンチンとα-トコトリエノールのリポソーム膜における至適比率の検討, *第56回日本薬学会・日本薬剤師会・日本病院薬剤師会 中国四国支部学術大会,* 2017年10月.
264. **小暮 健太朗, 石川 みすず, 平井 将太, 濵 進, 吉田 達貞, 髙橋 侑, 細井 信造, 福田 達也, 田中 保 :** α-トコトリエノールとアスタキサンチンの相乗的抗酸化効果, *第357回脂溶性ビタミン総合研究委員会,* 2017年12月.
265. **石川 みすず, 平井 将太, 濵 進, 細井 信造, 吉田 達貞, 髙橋 侑, 小暮 健太朗 :** トコトリエノールとアスタキサンチンの相乗的抗酸化効果への立体構造の影響, *第29回ビタミンE研究会,* 2018年1月.
266. **石川 みすず, 平井 将太, 濵 進, 細井 信造, 吉田 達貞, 髙橋 侑, 小暮 健太朗 :** アスタキサンチンとα-トコトリエノールの相乗的抗酸化効果における立体構造の影響, *日本薬学会138年会,* 2018年3月.
267. **平井 将太, 髙橋 侑, 田中 保, 福田 達也, 吉田 達貞, 小暮 健太朗 :** アスタキサンチンと抗酸化物質の組合せによる相乗的な活性酸素消去活性の向上., *日本薬学会138年会,* 2018年3月.
268. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスを基軸とする「脳関門中枢創薬科学」の新たな展開, *第24回創剤フォーラム若手研究会,* 2018年9月.
269. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスを基軸とした血液脳関門の攻略法:高分子輸送の分子機構とドラッグデリバリー, *富山大学和漢研セミナー (第416回),* 2019年2月.
270. **立川 正憲 :** ヒト血液脳関門における脳転移性メラノーマ由来エクソソームの輸送機構と種差, *日本薬学会第139年会,* 2019年3月.
271. **Masanori Tachikawa, Hiroki Kuroda, Yasuo Uchida *and* Tetsuya Terasaki :** The human-specific virus receptor CD46 makes a major contribution to the internalization of brain-metastatic melanoma-derived exosomes by human blood-brain barrier endothelial cells., *13th International Conference of Cerebral Vascular Biology (CVB2019),* Jun. 2019.
272. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスを基盤としたがんエクソソームとヒト血液脳関門研究, *株式会社エービー・サイエックスランチョンセミナー,* 2019年8月.
273. **立川 正憲 :** 中枢関門科学:Connecting the human dots, *第13回次世代を担う若手医療薬科学シンポジウム,* 2019年10月.
274. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスを基盤とした「脳関門創薬科学」研究, *第41回神経組織培養研究会,* 2019年11月.
275. **立川 正憲 :** 次世代型「脳関門創薬」拠点形成:ヒト血液-脳関門物流システム解明に基づく脳関門突破型抗体 ・核酸医薬の開発, *徳島大学研究クラスターシンポジウム,* 2019年11月.
276. **Masanori Tachikawa :** 血液脳関門透過性タンパク質と脳血管内皮細胞における輸送特性, *日本薬物動態学会第34年会,* Dec. 2019.
277. **稲垣 舞, 佐野 陽乃里, 中野 瑛介, 登美 斉俊, 立川 正憲 :** ヒト胎盤絨毛細胞株BeWo細胞由来エクソソームのヒト脳血管内皮細胞 (hCMEC/D3)への内在化, *日本薬学会第141年会,* 2020年3月.
278. **立川 正憲 :** 創薬における一細胞解析の重要性と解析事例, *シングルセル解析の偉力を学ぶ''「拡大版ジャーナルクラブ」(徳島大学大学院医歯薬学研究部 総合研究支援センター先端医療研究部門),* 2019年8月.
279. **Masanori Tachikawa :** Advanced quantitative proteomics and its application to the Blood-Brain Barrier research., *The University of British Columbia Faculty of Pharmaceutical Sciences Seminar,* Nov. 2019.
280. **S Sasaki, Y Zheng, T Mokudai, H Kanetaka, Masanori Tachikawa, M Kanzaki *and* T Kaneko :** Continuous release of O2/ONOO in plasma-exposed HEPES-buffered saline promotes TRP channel-mediated uptake of a large cation., *Plasma Processes and Polymers,* e1900257--, 2020.
281. **Momoko Sato, Yuka Sakamaki, Mai Inagaki, Kenichi Funamoto *and* Masanori Tachikawa :** 3D Human Blood-Brain Barrier Chip for Central Nervous System Drug Development, *Seventeenth International Conference on Flow Dynamics,* Oct. 2020.
282. **網藤 惇, 今野 源, 吉田 将人, 土井 隆行, 内田 康雄, 臼井 拓也, 寺崎 哲也, 立川 正憲 :** 細胞膜輸送及び細胞内タンパク結合に着目した環状デプシペプチドDestruxinEの立体特異的な活性発現の要因解明, *日本薬剤学会第35年会,* 2020年5月.
283. **立川 正憲 :** 脳内クリアランスシステムとしての血液くも膜関門輸送系の役割, *第43回日本神経科学会,* 2020年7月.
284. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスで解き明かす血液脳関門・血液くも膜関門, *第39回日本認知症学会学術集会,* 2020年11月.
285. **立川 正憲 :** 網羅的定量プロテオミクスに基づくプラズマ生体作用の分子的解明, *仙台''プラズマフォーラム'',* 2021年3月.
286. **Ryuta Jomura, Yu Tanno, Shin-Ichi Akanuma, Yoshiyuki Kubo, Masanori Tachikawa *and* Ken-Ichi Hosoya :** Contribution of monocarboxylate transporter 12 to blood supply of creatine on the sinusoidal membrane of the hepatocytes., *American Journal of Physiology, Gastrointestinal and Liver Physiology,* **Vol.321,** *No.2,* G113-G122, 2021.
287. **Keisuke Kitakaze, Miho Oyadomari, Jun Zhang, Yoshimasa Hamada, Yasuhiro Takenouchi, Kazuhito Tsuboi, Mai Inagaki, Masanori Tachikawa, Yoshio Fujitani, Yasuo Okamoto *and* Seiichi Oyadomari :** ATF4-mediated transcriptional regulation protects against β-cell loss during endoplasmic reticulum stress in a mouse model., *Molecular Metabolism,* **Vol.54,** 2021.
288. **Mai Inagaki *and* Masanori Tachikawa :** Transport characteristics of placenta-derived extracellular vesicles and its relevance to placenta-to-maternal tissues communication., *Chemical & Pharmaceutical Bulletin,* **Vol.70,** *No.5,* 324-329, 2022.
289. **Yuka Sakamaki, Mai Inagaki, Momoko Sato, Kenichi Funamoto *and* Masanori Tachikawa :** Reconstruction of perfusable human 3D microvasculature on a chip as an evaluation model of cancer cell extravasation and drug transport, *Eighteenth International Conference on Flow Dynamics,* Oct. 2021.
290. **Momoko Sato, Mai Inagaki, Yuka Sakamaki, Kenichi Funamoto *and* Masanori Tachikawa :** Reconstruction of 3D human brain microvasculature on a chip using brain endothelial cells, astrocytes and pericytes, *Eighteenth International Conference on Flow Dynamics,* Oct. 2021.
291. **杉山 司, 稲垣 舞, 佐藤 桃子, 吉田 将人, 土井 隆行, 和田 敬仁, 新保 裕子, 露崎 悠, 後藤 知英, 寺崎 哲也, 立川 正憲 :** ヒト脳血管内皮細胞におけるクレアチンプロドラッグのクレアチントランスポーター非依存的輸送の実証, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
292. **網藤 惇, 今野 源, 吉田 将人, 土井 隆行, 稲垣 舞, 寺崎 哲也, 立川 正憲 :** 中分子環状デプシペプチドDestruxin Eの細胞膜輸送・細胞内代謝・分子標的V-ATPase阻害における立体特異性の解明, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
293. **木下 暢, 大野 大樹, 小迫 英尊, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** 網羅的プロテオミクスを用いたヒト脳毛細血管内皮細胞への内在化活性を示す脳転移性メラノーマSK-Mel-28由来細胞外小胞の特性解析, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
294. **酒巻 祐花, 稲垣 舞, 佐藤 桃子, 船本 健一, 立川 正憲 :** マイクロ流体デバイスを用いた灌流性を有する三次元ヒト微小血管網の再構築, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
295. **佐野 陽乃里, 稲井 美紅, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** ヒト脳血管内皮細胞(hCMEC/D3細胞)におけるヒト胎盤絨毛細胞株BeWo細胞から分泌される細胞外小胞の輸送特性, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
296. **中野 瑛介, 稲井 美紅, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** ヒト胎盤栄養膜細胞(BeWo細胞)由来細胞外小胞の胎盤への再取り込み輸送機構の解明, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
297. **稲井 美紅, 稲垣 舞, 赤沼 伸乙, 細谷 健一, 立川 正憲 :** マイクロRNAの妊娠マウス脳への分布とヒト脳血管内皮細胞における胎盤由来細胞外小胞を介した輸送, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
298. **立川 正憲, 稲垣 舞 :** 末梢から中枢への情報伝達制御装置としての血液脳関門物流システムの役割と脳への薬物送達, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
299. **稲垣 舞, 立川 正憲 :** 胎盤治療の基盤としての胎盤関門・細胞外小胞輸送システム, *日本薬剤学会第36年会,* 2021年5月.
300. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクス解析から見えてきた中枢-免疫インターフェースとしての血液脳関門の役割, *第44回日本神経科学会,* 2021年7月.
301. **北風 圭介, 親泊 美帆, 張 君, 濱田 良真, 竹之内 康広, 坪井 一人, 稲垣 舞, 立川 正憲, 藤谷 与士夫, 岡本 安雄, 親泊 政一 :** ATF4を介した転写制御は小胞体ストレスによる膵β細胞の喪失を防ぐ, *第62回日本生化学会中国・四国支部例会,* 2021年9月.
302. **稲垣 舞, 杉山 司, 佐藤 桃子, 吉田 将人, 土井 隆行, 和田 敬仁, 新保 裕子, 露崎 悠, 後藤 知英, 寺崎 哲也, 立川 正憲 :** ヒト血液脳関門モデルhCMEC/D3細胞におけるクレアチンプロドラッグの輸送特性, *第42回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム,* 2021年10月.
303. **高橋 駿太, 稲垣 舞, 野口 幸希, 西村 友宏, 登美 斉俊 :** マウス胎盤におけるPGE2受容体の発現解析, *第29回日本胎盤学会学術集会,* 2021年11月.
304. **Mai Inagaki, Hinori Sano, Miku Inai, 赤沼 伸乙, 細谷 健一 *and* Masanori Tachikawa :** ヒト脳血管内皮細胞における胎盤栄養膜細胞から分泌される細胞外小胞の輸送特性, *第36回日本薬物動態学会,* Nov. 2021.
305. **立川 正憲 :** ヒト血液脳関門物流システムの解明と「脳関門創薬」, *北勢バイオコミュニティ研究会セミナー,* 2021年11月.
306. **立川 正憲 :** 定量プロテオミクスが拓いた脳関門物流システム-Brain Barrier Logistics-解明研究, *第14回日本薬物動態学会ショートコース,* 2021年11月.
307. **佐藤 桃子, 稲垣 舞, 酒巻 祐花, 船本 健一, 立川 正憲 :** マイクロ流体デバイスを用いた三次元ヒト脳微小血管網の構築, *日本薬学会第142年会,* 2022年3月.
308. **立川 正憲, 稲垣 舞 :** ヒト血液脳関門における細胞外小胞輸送システムの多様性と特異性, *日本薬学会第142年会,* 2022年3月.
309. **立川 正憲 :** -, *日本薬物動態学会ニュースレター,* **Vol.36,** *No.4,* 2021年8月.
310. **立川 正憲, 稲垣 舞 :** 脳の発達を支える血液脳関門物流システムの可塑的変化, *Clinical Neuroscience,* **Vol.40,** *No.12,* 1540-1543, 2022年12月.
311. **Mai Inagaki :** Decoding the placenta-to-maternal organs communication, *Special conference at IRCM,* Oct. 2022.
312. **Yuka Sakamaki, Mai Inagaki, Momoko Sato, Kenichi Funamoto *and* Masanori Tachikawa :** Visualization of extracellular vesicles transport across brain microvasculature in a human 3D blood-brain barrier chip, *Nineteenth International Conference on Flow Dynamics,* Nov. 2022.
313. **Masanori Tachikawa *and* Mai Inagaki :** Placenta-derived Extracellular Vesicles: their uniqueness and characteristics of the human Blood-Brain Barrier transport., *15th International Symposium on Nanomedicine (ISMN2022),* Dec. 2022.
314. **杉下 友香, 稲垣 舞, 馬渡 一諭, 小迫 英尊, 三宅 雅人, 親泊 政一, 立川 正憲 :** ヒト脳血管内皮細胞(hCMEC/D3細胞)におけるCD147-トランスポーター複合体の役割, *日本薬剤学会第37年会,* 2022年5月.
315. **酒巻 祐花, 稲垣 舞, 佐藤 桃子, 中野 瑛介, 船本 健一, 立川 正憲 :** マイクロ流体デバイスを用いた三次元血管網モデルの構築と胎盤由来細胞外小胞の動態可視化, *日本薬剤学会第37年会,* 2022年5月.
316. **Masanori Tachikawa *and* Mai Inagaki :** マイクロ流体デバイスを用いた三次元ヒト血液脳関門の再構築と特性解析, *第44回神経組織培養研究会,* Sep. 2022.
317. **中野 瑛介, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** ヒト胎盤栄養膜細胞(BeWo細胞)が分泌する細胞外小胞の分泌元細胞への再取り込み機構, *第16回次世代を担う若手のための医療薬科学シンポジウム,* 2022年10月.
318. **今井 健, 稲垣 舞, 佐藤 桃子, 船本 健一, 立川 正憲 :** マイクロ流体デバイスを用いた3次元ヒト脳血管網の再構築, *第61回日本薬学会・日本薬剤師会・日本病院薬剤師会 中国四国支部学術大会,* 2022年11月.
319. **平沢 介, 稲垣 舞, 稲井 美紅, 小迫 英尊, 立川 正憲 :** ヒト胎盤関門モデル細胞(BeWo細胞・JEG-3細胞)におけるトランスポータータンパク質発現プロファイルの比較解析, *第61回日本薬学会・日本薬剤師会・日本病院薬剤師会 中国四国支部学術大会,* 2022年11月.
320. **Mai Inagaki, 佐藤 桃子, 船本 健一 *and* Masanori Tachikawa :** マイクロ流体デバイス上に構築した3次元ヒト脳血管網の特性解析, *第37回日本薬物動態学会,* Nov. 2022.
321. **立川 正憲 :** ヒト血液脳関門-Blood-Brain Barrier (BBB)-を知る，創る，操る:物流システムの解明からHuman BBB on-a-Chipへの展開, *化学とマイクロ・ナノシステム学会 第46回研究会,* 2022年11月.
322. **立川 正憲 :** 研究の神様はチャンスをくれた―小さなクレアチントランスポーター欠損症研究の物語∼クレアチン脳欠乏症を治療可能な小児神経疾患に, *第28回小児神経症例検討会,* 2023年2月.
323. **橋本 彩伽, 稲垣 舞, 田良島 典子, 山内 駿弥, 南川 典昭, 立川 正憲 :** 環状ジヌクレオチドによるヒト脳微小血管内皮細胞STING経路の活性化, *日本薬学会第143年会,* 2023年3月.
324. **谷澤 輝嗣, 稲垣 舞, 小迫 英尊, 安藤 英紀, 石田 竜弘, 立川 正憲 :** 抗ヒト脳微小血管内皮細胞抗体の標的受容体の探索, *日本薬学会第143年会,* 2023年3月.
325. **稲垣 舞, 中野 瑛介, 立川 正憲 :** 胎盤分泌細胞外小胞のヒト胎盤栄養膜細胞への内在化機構, *日本薬学会第143年会,* 2023年3月.
326. **繁昌 志帆, 手賀 悠真, 赤沼 伸乙, 久保 義行, 稲垣 舞, 立川 正憲, 細谷 健一 :** ヒト脳毛細血管内皮細胞株hCMEC/D3細胞におけるcreatine輸送の特徴, *日本薬学会第143年会,* 2023年3月.
327. **網藤 惇, 稲垣 舞, 吉田 将人, 土井 隆行, 立川 正憲 :** ヒト胎盤栄養膜細胞(BeWo細胞)におけるクレアチンプロドラッグ輸送機構の解明, *日本薬学会第143年会,* 2023年3月.
328. **Kazuki Sone, Yuka Sakamaki, Satomi Hirose, Mai Inagaki, Masanori Tachikawa, Daisuke Yoshino *and* Kenichi Funamoto :** Hypoxia suppresses glucose-induced increases in collective cell migration in vascular endothelial cell monolayers, *Scientific Reports,* **Vol.14,** *No.1,* 5164, 2024.
329. **稲垣 舞, 立川 正憲 :** 胎盤 - 母体臓器連関を担う細胞外小胞の輸送機構, *月刊『細胞』,* **Vol.56,** *No.3,* 13-16, 2024年3月.
330. **Masanori Tachikawa :** Decoding, Building, and Manipulating of the Human Blood-Brain Barrier: Perspectives on Brain-targeting Drug Delivery Systems, *43rd Pharmacological and Therapeutic Society of Thailand Meeting,* Bangkok, May 2023.
331. **Masanori Tachikawa, Mai Inagaki, Hinori Sano, Momoko Sato, Hidetaka Kosako *and* Kenichi Funamoto :** Placenta-derived Extracellular Vesicles: their unique characteristics of the Blood-Brain Barrier (BBB) transport, *25th Symposium Signal Transduction at the Blood-Brain Barriers,* Jun. 2023.
332. **Masanori Tachikawa, Mai Inagaki, Kenichi Funamoto, Hinori Sano, Eisuke Nakano, Miku Inai, Momoko Sato *and* Yuka Sakamaki :** Characteristics of placenta-derived extracellular vesicles (pEVs) at the human blood-brain barrier, *The Cerebral Vascular Biology, CVB 2023 meeting,* Jun. 2023.
333. **Mai Inagaki, Masahito Yoshida, Tsukasa Sugiyama, Ayaka Taii, Yu Tsuyusaki, Tomohide Goto, Takahito Wada, Takayuki Doi, Tetsuya Terasaki *and* Masanori Tachikawa :** y+L-type amino acid transporter y+LAT2 functions as a transport system for creatine prodrug in human brain microvessel endothelial cells, *The Cerebral Vascular Biology, CVB 2023 meeting,* Jun. 2023.
334. **Mai Inagaki, Eisuke Nakano *and* Masanori Tachikawa :** Reuptake system of extracellular vesicles in human trophoblast cell line, *International Federation of Placenta Association 2023,* Sep. 2023.
335. **Kai Hirasawa, Mai Inagaki, Miku Inai, Makoto Amifuji, Hidetaka Kosako *and* Masanori Tachikawa :** Proteomics-based comparison of transporter expression profiles in BeWo and JEG-3 cells, *International Federation of Placenta Association 2023,* Sep. 2023.
336. **Hiroaki Yata, Tsubasa Inokuma, Mai Inagaki, Makoto Amifuji *and* Masanori Tachikawa :** Glucose transporter-mediated transport of newly synthesized creatine analog in human blood brain barrier endothelial cells, *2023 International Joint Meeting of the 23rd International Conference on Cytochrome P450 and the 38th Annual Meeting of Japanese Society for the Study of Xenobiotics,* Sep. 2023.
337. **Sakura Mama, Mai Inagaki, Harunori Yoshikawa, Ken Imai *and* Masanori Tachikawa :** Determination of transporter mRNA levels in the isolated polysomes of human blood-brain barrier endothelial cells, *2023 International Joint Meeting of the 23rd International Conference on Cytochrome P450 and the 38th Annual Meeting of Japanese Society for the Study of Xenobiotics,* Sep. 2023.
338. **Toshiki Shimizu, Mai Inagaki, Makoto Amifuji, Shota Sasaki, Toshiro Kaneko *and* Masanori Tachikawa :** Differential enhancement effects of non-equilibrium atmospheric pressure plasma irradiation on membrane transport in human-derived cells, *2023 International Joint Meeting of the 23rd International Conference on Cytochrome P450 and the 38th Annual Meeting of Japanese Society for the Study of Xenobiotics,* Sep. 2023.
339. **Eisuke Nakano, Mai Inagaki *and* Masanori Tachikawa :** Reuptake mechanisms of human placental trophoblast cells-derived extracellular vesicles in the placental trophoblast cells, *2023 International Joint Meeting of the 23rd International Conference on Cytochrome P450 and the 38th Annual Meeting of Japanese Society for the Study of Xenobiotics,* Sep. 2023.
340. **Mai Inagaki :** Role of the blood-brain barrier transport systems for extracellular vesicles in placenta-to-brain communication, *IRCMS Symposium, Rise of Diversity in Science,* Sep. 2023.
341. **Masanori Tachikawa, Moemi Hidaka, Yuka Sakamaki, Kenichi Funamoto *and* Mai Inagaki :** Usefulness of the human blood-brain barrier on a chip for brain-targeting drug development, *Twentieth International Conference on Flow Dynamics,* Nov. 2023.
342. **Mai Inagaki :** As a researcher, teacher, leader, manager, communicator, decision maker, caregiver, life-long learner, and as a person, *Symposium to Promote Gender Balance and Diversity in Science, Diverse Perspectives of Woman in Science To Support the Next Generation,* Feb. 2024.
343. **平沢 介, 茂谷 康, 稲垣 舞, 小迫 英尊, 立川 正憲 :** Biotinylation by Antibody Recognition法を用いたヒト脳血管内皮細胞におけるCD147-膜輸送体複合体の分子実体解明, *日本薬剤学会第38年会,* 2023年5月.
344. **Masanori Tachikawa :** Coordinated roles of glymphatic system and brain barriers, *2023 International Joint Meeting of 23rd ICCP450/38th JSSX,* Sep. 2023.
345. **網藤 惇, 今野 源, 吉田 将人, 土井 隆行, 稲垣 舞, 寺崎 哲也, 立川 正憲 :** 中分子環状デプシペプチドDestruxin Eの細胞内動態を規定する取り込み，排出及び代謝機構の解明, *第44回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム,* 2023年10月.
346. **立川 正憲, 稲垣 舞 :** 胎盤-脳連関機構に立脚したヒト血液脳関門・細胞外小胞輸送システムの解明, *第44回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム,* 2023年10月.
347. **髙塚 雅貴, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** フローサイトメトリーと超解像度顕微鏡を用いたヒト脳血管内皮細胞における胎盤由来細胞外小胞の取込み特性と細胞内局在性解析, *第62回日本薬学会・日本薬剤師会・日本病院薬剤師会 中国四国支部学術大会,* 2023年10月.
348. **立川 正憲, 稲垣 舞 :** プロテオミクス×マイクロ流体デバイスで挑むヒト血液脳関門を突破する抗体開発, *第45回日本神経組織培養研究会,* 2023年12月.
349. **橋本 彩伽, 稲垣 舞, 酒巻 祐花, 万々 桜, 梶 弘和, 立川 正憲 :** ヒト脳関門を模倣するスフェロイド・マイクロ流体モデル, *2023年度生体医歯工学共同研究拠点成果報告会,* 2024年3月.
350. **稲井 美紅, 稲垣 舞, 田丸 浩, 立川 正憲 :** スイホウガンを用いた抗ヒト脳微小血管内皮細胞抗体の作製, *日本薬学会第144年会,* 2024年3月.
351. **佐野 陽乃里, 山本 圭, 稲垣 舞, 三木 寿美, 髙塚 雅貴, 立川 正憲 :** ヒト胎盤絨毛細胞から分泌される細胞外小胞の特性とヒト脳微小血管内皮細胞への取り込み機構, *日本薬学会第144年会,* 2024年3月.
352. **日高 萌実, 佐々木 一成, 稲垣 舞, 立川 正憲 :** グローバルプロテオミクスによる妊娠マウスの脳微小血管において発現変動するタンパク質の同定, *日本薬学会第144年会,* 2024年3月.
353. **Masanori Tachikawa :** Decoding and manipulating of the human blood-brain barrier logistics for brain-targeting delivery of macromolecules, *Seminar at Uppsala University,* Jun. 2023.
354. **Makoto Amifuji, Mai Inagaki, Masahito Yoshida, Takayuki Doi *and* Masanori Tachikawa :** Characteristics of membrane transport, metabolism, and target protein binding of cyclic depsipeptide destruxin E in HeLa cells, *Drug Metabolism and Pharmacokinetics,* **Vol.58,** 101028, 2024.
355. **橋本 彩伽, 稲垣 舞, 田良島 典子, 南川 典昭, 立川 正憲 :** ヒト血液脳関門・くも膜関門におけるcGAS-STING経路が関わる自然免疫応答機構の役割, *日本薬剤学会第39年会,* 2024年5月.
356. **万々 桜, 稲垣 舞, 吉川 治孝, 立川 正憲 :** ヒト脳微小血管内皮細胞ポリソーム画分における輸送体mRNAの発現量解析, *日本薬剤学会第39年会,* 2024年5月.
357. **平沢 介, 茂谷 康, 稲垣 舞, 田良島 典子, 南川 典昭, 小迫 英尊, 立川 正憲 :** ヒト脳微小血管内皮細胞におけるSTING経路活性化に伴う細胞膜タンパク質変動の解明, *日本薬剤学会第39年会,* 2024年5月.
358. **矢田 浩晃, 猪熊 翼, 稲垣 舞, 網藤 惇, 立川 正憲 :** 血液脳関門グルコーストランスポーターを介して輸送されるクレアチンプロドラッグの開発, *日本薬剤学会第39年会,* 2024年5月.