

# 索引

## 和文

### あ

アカデミア創薬 12, 23, 24, 27, 120  
 アスコフラノン…………… 212  
 アッセイ系…………… 38  
 アッセイレディプレート…………… 32  
 アディポネクチン受容体アゴニスト  
 …………… 197  
 アフリカ睡眠病…………… 212  
 アポトーシス…………… 192  
 アポトーシス性細胞死…………… **192**  
 アポトソーム…………… **193**  
 アミロイドβ…………… 89  
 アラニンスキャンニング変異導入法  
 …………… **148**  
 アルツハイマー病…………… 89, 138  
 アロステリック…………… 169  
 アロステリック阻害剤…………… 134  
 アロディニア…………… 195  
 アンドロゲン受容体アンタゴニスト  
 …………… 156  
 移植片拒絶…………… 188  
 遺伝子調節化学療法・予防…………… 168  
 遺伝子特許…………… 125  
 遺伝子発現特性解析…………… 57  
 イミダフェナシン…………… 97  
 医薬化学…………… 19  
 インシリコスクリーニング  
 …………… 29, 77, 104, **105**  
 インスリン抵抗性…………… 140  
 運動模倣薬…………… 201  
 エコファーマ…………… 113, 114, 115  
 エピゲノム…………… 177  
 塩橋…………… **101**  
 塩酸テロジリン…………… 97  
 エンドポイント…………… 89  
 エンピロキシム様化合物…………… 207  
 オートタキシン…………… 127  
 オーフアンドラッグ…………… 210  
 オープンイノベーション  
 …………… 22, 23, 120

オールトランスレチノイン酸… 172  
 オキシステロール結合タンパク質  
 ファミリー I …………… 207

### か

カイコ…………… 146  
 カウンターアッセイ…………… **14**  
 科学技術…………… 125  
 核磁気共鳴…………… 78  
 学術発表…………… 121  
 確定ヒット化合物…………… 12, 15, 17  
 核内受容体…………… 153  
 化合物空間…………… 111  
 化合物スクリーニング…………… 36  
 化合物バンク…………… 28  
 化合物ライブラリー…………… 28, 37, 55  
 過剰メチル化…………… 167  
 仮想化合物ライブラリー…………… 110  
 活性依存型プローブ…………… 59  
 カルシニューリン阻害剤…………… 185  
 カルボラン…………… 158  
 がん遺伝子…………… 168  
 幹細胞…………… **179**  
 患者救済…………… 125  
 がん抑制遺伝子…………… 168  
 機械学習…………… **105**  
 稀少疾患…………… 22  
 希少疾病…………… 210  
 希少疾病用医薬品…………… 210  
 既存薬…………… 115  
 キナーゼ…………… 60, 133  
 キナーゼ阻害活性…………… 181  
 忌避部分構造…………… **33**  
 急性骨髄性白血病… 108, 171, **179**  
 急性前骨髄球性白血病…………… 155  
 急性前骨髄球性白血病における  
 オールトランスレチノイン酸療法と  
 亜ヒ酸療法…………… **172**  
 疑陽性化合物…………… 14  
 極性官能基…………… 100  
 極低温電子顕微鏡…………… 79  
 筋萎縮性側索硬化症…………… 150

クマリン…………… 156  
 グラクソスミスクライン社…………… 169  
 グリーンケミストリー…………… 118  
 グリーンファルマ…………… 118  
 クリック反応…………… **69**  
 クルクミン…………… 157  
 クロライドイオン…………… 116  
 蛍光イメージング…………… 57  
 蛍光指示薬…………… 164  
 蛍光プローブ…………… 64  
 蛍光偏光法…………… 65  
 ゲノム…………… 171, 172  
 ゲフィチニブ…………… 168  
 ケミカルアグリゲーション…………… 40  
 ケミカルクラスタリング…………… **15**  
 ケミカルバイオロジー…………… **55**, 134  
 ケモプロテオミクス…………… 55  
 健康長寿…………… 200  
 検出用官能基…………… 67  
 コア…………… 192  
 抗PV薬…………… 206  
 抗ウイルス薬…………… 206  
 炎症症剤…………… 185  
 合成展開…………… 42  
 構造活性相関…………… 42, 47  
 構造最適化…………… 96, 122  
 高速スクリーニング…………… 114  
 抗体療法…………… 175  
 個別化医療…………… 88  
 コンパニオン診断薬…………… **13**, 87

### さ

最適化…………… 15  
 最適化合成…………… 18  
 ザイモグラフィ法…………… **61**  
 サリドマイド…………… 58  
 産学連携…………… 12, 120  
 サンドイッチ培養ヒト肝細胞…………… 95  
 ジアジドプローブ法…………… 70  
 シアン耐性酸化酵素…………… 212  
 時間分解蛍光アッセイ…………… 65  
 シクロスポリン…………… 188

自己免疫疾患	184	阻害剤	128	認知症	90
自己リン酸化	135	<b>た</b>		ネクロシス	191
示差走査型蛍光定量法	81	ターゲット検証	52	ネクロシス性細胞死	<b>192</b>
システインプロテアーゼ	60	代替エンドポイント	87	脳梗塞	190
疾患関連因子	47	代替動物モデル	146	<b>は</b>	
疾患関連分子	13	代謝拮抗剤	185	バイオベンチャー	22
疾患原因因子	46	代謝部位予測	111	バイオマーカー	86
疾患修飾薬	90	体内動態	110	ハイコンテントスクリーニング	57
シトクロム P450	60	タイプ1 阻害剤	134	ハイスループットスクリーニング	28, 36, 64, 113
死の谷	18	タイプ2 阻害剤	134	パイロットスクリーニング	39
脂肪族アジド基	71	タウ	138	橋渡し研究	20, 22
シャペロン	136	タクロリムス	188	白血病幹細胞	179
修飾オリゴヌクレオチド	162	脱髄	195	白血病ヒト化マウス	<b>180</b>
小核試験	<b>16</b>	ダブラフェニブ	169	パロキセチン	116
小胞体関連分解	<b>150</b>	ダルナビル	79	ビオチン化プローブ	69
シングルトン	<b>15</b>	胆汁排泄クリアランス	95	光親和性標識プローブ	67
シンクロトロン放射光施設	77	タンパク質間相互作用	55, 147	光親和性標識法	58, 67
神経疾患	138	チアゾリジン誘導体	143	光反応性官能基	67
神経障害性疼痛	115	知的財産権	34	ヒストン脱アセチル化酵素	60
神経障害性疼痛治療薬	116	中外製薬	169	ビタミンA	154
神経障害性疼痛発症モデル	115	中性子捕獲療法	158	ヒット化合物	<b>33</b>
神経障害性疼痛病態モデル (Chung 変法)	<b>116</b>	低分子化合物	147	ヒットセレクション	41
心室性頻脈	<b>97</b>	定量PCR	57	ヒト AML 動物モデル	182
スキルス胃がん	<b>100, 101</b>	データQC	41	表現型アッセイ	37, 56
スクリーニング	28, 115, 122, 133, 169	適応拡大	115	標的分子	37, 38
スクリーニングカスケード	38	適格性確認	89	表面プラズモン共鳴測定	85
ステロイドホルモン	153	電気泳動	61	ファーマコフォア	<b>157</b>
スパコン創薬	190	天然物ライブラリー	27	フェノタイプアッセイ	37
スフィゴシン-1-リン酸受容体1	25	等温滴定型熱量測定	85	フォールディング	133, 135
生活習慣病	201	導出	16	フォスタグ	<b>136</b>
生活の質	98	毒性	110	複合体X線の炭素原子結晶構造	183
生体直交型官能基	69	毒性試験	88	物質特許	122, <b>123</b>
生物学的製剤	185	特許	20, 34	物理化学的評価	84
セリンプロテアーゼ	60	特許協力条約国際出願	124	フローサイトメトリー	57
セルベーススクリーニング	135	特許出願	121	プロサイモシンα	191
臓器選択性	98	ドッキング	104, <b>105</b>	プロテオーム	58
創薬シーズ	113, 114	ドラッグデリバリーシステム	188	プロミスカスヒット	42
創薬支援ネットワーク	27	ドラッグライクネス	<b>123</b>	分子動力学	107
創薬等支援技術基盤プラットフォーム	27	ドラッグリポジショニング	58	分子標的型アッセイ	56
創薬に対する作業仮説	51	トラメチニブ	168	分子標的薬	47
創薬標的	12	トランスポーター	95	米国FDA (食品医薬品局)	169
創薬標的分子	13, 46	トリパノソーマ症	110, 212	ペナンブラ	192
ソーキング	81, 82	<b>な</b>		ペニシリン	124
		難水溶性	100	ペプチド創薬	195
		2型糖尿病	140	ペプチドマスフィンガープリン ティング	<b>58</b>
		日本発新薬	120		

ペムラフェニブ…………… 170  
 ペルオキシソーム増殖剤応答性受容体  
 …………… 99  
 変異遺伝子…………… 174  
 変動係数…………… 39  
 芳香族アジド基…………… 67, 71  
 ホスファチジルイノシトール  
 4-キナーゼ…………… 207  
 ボトルネック…………… 19  
 ポリエチレンイミン…………… 135  
 ポリオウイルス…………… 205  
 ポリオ根絶計画…………… 205  
 翻訳後修飾…………… 55

**ま**  
 マイクロRNA…………… 160  
 マイナーエンピロキシム様化合物  
 …………… 207  
 慢性拒絶…………… 188  
 慢性疼痛…………… 190  
 ミクログリア…………… 115  
 ムスカリン受容体…………… **97**  
 メディシナルケミスト…………… 96  
 メディシナルケミストリー…………… 133  
 メラノーマ…………… 166, 167, 168  
 免疫アッセイ…………… 57  
 免疫シナプス…………… **187**  
 免疫不全マウス…………… 180  
 免疫抑制剤…………… 184

**や・ら**  
 薬物動態…………… 88  
 有機小分子蛍光プローブ…………… 60  
 用途特許…………… **122**  
 ランゲンドルフ摘出心臓法…………… **16**  
 ランダムスクリーニング…………… 29  
 リード化合物…………… **33, 37, 41, 124**  
 リゾホスファチジン酸  
 …………… 127, 140, 195  
 立体構造解析…………… 28  
 リポジショニング…………… 31  
 臨床試験…………… 18, 87  
 臨床試験候補化合物…………… 15  
 臨床治験…………… 16  
 ルシフェラーゼ…………… 134  
 レチノイド…………… 153  
 レチノイン酸…………… **154**  
 レニン阻害剤のアリスキレン…………… 80  
 レポーター遺伝子アッセイ…………… 57

## 欧文

**A**  
 ABPP (activity-based protein  
 profiling)…………… 59  
 activity-based probe…………… 59  
 AdipoRon…………… 201  
 ADME…………… **82, 105**  
 ADMET…………… **15**  
 ADNI…………… 90  
 affinity enrichment…………… 58  
 allosteric modulator…………… 49  
 AlphaScreen テクノロジー …… **136**  
 ALS (amyotrophic lateral  
 sclerosis)…………… 150  
 AML…………… **179**  
 AMLにおける治療判定基準 …… **175**  
 ATP 結合ポケット…………… 183  
 ATX/NPP2…………… 127  
 AUC…………… **16**

**B**  
 BDNF…………… 116  
 best-in-class 創薬…………… 45, **46**  
 bioorthogonal 官能基…………… 69  
 BRAF…………… 167  
 BRAF が変異しているメラノーマ  
 …………… 168  
 BRAF 阻害剤 …… 166, 167, 169, 170  
 BRAF 変異…………… 166, 167, 169  
 BRAF 変異メラノーマ…………… 169, 170

**C**  
 caged 化合物…………… **156**  
 CD34<sup>+</sup>CD38<sup>-</sup>細胞…………… **180**  
 CDC37…………… 136  
 CDK…………… 168  
 CDK 阻害因子…………… 167  
 cell-based…………… 169  
 cell-based assay…………… 168, 169  
 cell-free…………… 169  
 cell-free assay…………… 168  
 CH5126766…………… 169  
 Chung 変法…………… **116**  
 Cohesin…………… 174  
 CV 値 (coefficient of variation) **39**  
 CYP…………… **16**

**D**  
 dabrafenib…………… 166, 169  
 data quality control…………… 41  
 DHOD…………… 109  
 Dicer…………… 161  
 DOCK2…………… 184  
 docking…………… **105**  
 DPP IV…………… 54  
 Drosha…………… 161  
 druggable protein…………… 53  
 DSF (different scanning fluorim-  
 etry)…………… 81, 83  
 DYRK1A…………… 138

**E・F**  
 EC 分類…………… 60  
 ENCODE…………… 160  
 ERAD (ER-associated  
 degradation)…………… **150**  
 EU-OpenScreen…………… 25  
 European Lead Factory  
 …………… 25, 26, 27  
 false positive…………… **14**  
 FBDD (fragment based drug  
 discovery)…………… 76, 80  
 FBLD…………… 81  
 FDA…………… 169  
 first-in-class…………… **36, 45**  
 FLT3 阻害剤…………… 176  
 fragment 化合物…………… **30**  
 FTY720…………… 186

**G**  
 gain of function 変異…………… 49  
 gefitinib…………… 168  
 gene expression signature analysis  
 …………… 57  
 GLP (good laboratory practice) 20  
 GLP-Tox 試験…………… **15**  
 GMP 製剤…………… **131**  
 GPCR クラス分類…………… **49**  
 GPCR 創薬…………… 50  
 GSK 社…………… 169

**H**  
 HaloTag…………… **136**  
 HCK…………… 179  
 hERG…………… **16**  
 high content screening…………… 57

hit-to-lead	41	NTDs (neglected tropical diseases)	210	RAF	169
HIV-1 プロテアーゼ阻害剤		off target 効果	52	RAF-MEK 経路	168
ダルナビル	79	on target 副作用	47	RAF/MEK 阻害剤	169
HSP90	136	orphan drug	210	Random Forest	108
HTS (high throughput screening)	36, 64, 164	OSBP	208	RAS 変異腫瘍	169
<b>I・J</b>		OSBP ファミリー I	208	RAS-RAF-MEK 経路	168
immunoassay	57	oxysterol-binding protein family I	207	RB	167, 168, 169
induced fit	78	<b>P</b>		RB 再活性化スクリーニング	167, 168, 169
INDY	138	P2X4 受容体	116	reporter gene assay	57
Innovative Medicines Initiative	25, 26	p15	168, 169	rolling circle amplification	163
<i>in silico</i> screening	105	p16	167, 168	<b>S</b>	
<i>in vitro</i> 増殖阻害活性	182	p18	168	SAR	47
<i>in vivo</i> スクリーニング	146	p19	168	S/B 比 (signal/background ratio)	39
ITC	85	p21	167	SBDD	104, 105
JT 医薬総合研究所	169	p21/WAF1	167	scaffold 化合物	30
<b>L・M</b>		p27	169	SciFinder	122
LAILAPS	106	p27	169	SDPK	15
LBDD	104, 105	p53	148, 167, 168, 169	seed 領域	161
LPA	195	PAINS (pan assay interference compounds)	137	SILAC 法	58
LPA 第4受容体 (LPA4)	140	PALLAS	107	Spliceosome	174
LPA <sub>1</sub> 受容体	195	PAM	50	SPR	85
M3/M1 デュアル拮抗薬	101	PCP	15	Staudinger-Bertozzi ライゲーション反応	74
MCI	90	PCT (Patent Cooperation Treaty) 国際出願	124	structure based drug design	76
MDM2 (murine double minute 2)	148	P-gp	82	Support Vector Machine	108
MDMX (murine double minute X)	148	PI4K	207	SUR1 (sulfonylurea receptor 1)	49
MEK 阻害剤	166, 167, 169, 170	PI4KB	207	synthetic lethality	13
Mekinist	166, 169	PI4KB 阻害剤	207	<b>T</b>	
microAMES	16	PI4KB/OSBP 経路	208	T-00127-HEV1	207
miravirsin	163	Pim1	108	TAO (trypanosome alternative oxidase)	212
miRBase	161	PMDA	91	therapeutic window	195
MLL 転座白血病	177	POC (proof of concept)	19	TLR4	192
MNT	16	PPAR $\gamma$	142, 143	TOOS [ <i>N</i> -エチル- <i>N</i> -(2-ヒドロキシ-3-スルホプロピル)-3-メトキシアニリン] 試薬	130
mobility shift assay 法	181	PPI (protein-protein interaction)	147	t-PA	195
Molecular Libraries Program	24	PPI 創薬	50	trametinib	166, 168, 169
MUSES	108	preclinical AD	90	<b>V・X・Z</b>	
<b>N・O</b>		promiscuous hit	42	vemurafenib	166, 170
NMR	78	proximity ligation assay	136	X線結晶構造解析	77
N-RAS	167	PS 修飾	162	X線高次構造解析	130
National Center for Advancing Translational Sciences	25	PubChem	24, 29	X線自由電子レーザー (XFEL)	77
non-coding RNA	160	<b>Q・R</b>		Z'値 (Z'-factor)	39
NPM1	174	QOL	98		
		quantitative PCR	57		
		Rac	188		