

## 索引

## 数字

- I型インターフェロン…………… 230  
2Dクラス分類…………… 114, 115

## 和文

## あ

- アカデミア創薬…………… 4, 27, 229  
アフィニティ精製…………… 83  
アプタマー…………… 131  
アミノグリコシド系抗生物質… 130  
安全性評価…………… 44  
アンチジーン核酸…………… 131  
アンチセンス核酸…………… 131  
アンメットメディカルニーズ… 3

## い

- イオン化抑制…………… 57  
異常分散法…………… 134  
遺伝子改変動物…………… 185  
遺伝子改変マウス…………… 7  
遺伝的バリエーション…………… 49  
医薬品安全性評価…………… 6  
陰窩…………… 91

## う・え

- ウェル型…………… 50  
液滴型…………… 49  
エクソスキッピング…………… 198  
エピゲノム…………… 124  
エピゲノム創薬…………… 7, 127  
エピジェネティクス…………… 123  
エピトープ…………… 166  
エピトランスクリプトミクス  
…………… 42, 46  
エピマー…………… 160  
塩析効果…………… 134  
エンドリソソーム…………… 228  
塩溶効果…………… 134

## お

- オープンイノベーション…………… 4  
オフターゲット…………… 186  
オリゴDNA付加抗体…………… 65  
オルガノイド…………… 226  
オンターゲットサイトでの大規模  
変異…………… 186

## か

- 概日リズム…………… 98  
回腸…………… 94  
解糖系…………… 232  
核酸医薬…………… 38, 131  
核磁気共鳴分光法…………… 26, 105  
化合物生成AI…………… 138  
化合物ライブラリ  
…………… 8, 21, 27, 33, 42, 137, 207  
がん…………… 58, 167, 172  
環状ペプチド…………… 158  
感染症…………… 116  
完全ヒト抗体産生動物…………… 192  
がん特異的抗体…………… 169

## き

- 機械学習…………… 143  
キメラ化抗体…………… 167  
急性骨髄性白血病…………… 172  
強化学習…………… 143  
局在解析…………… 60  
極低温集束イオンビーム…………… 119  
近交系マウス…………… 185  
近接ラベリング法…………… 61

## く

- 空間オミクス…………… 6, 64  
空間トランスクリプトミクス… 64  
空間マルチオミクス…………… 64  
空腸…………… 94  
組換えタンパク質発現…………… 83  
クライオ専用透過型電子顕微鏡  
…………… 110  
クライオ電子顕微鏡  
…………… 7, 25, 110, 116, 137

- クライオ電子顕微鏡法…………… 105  
クライオ電子線トモグラフィ  
…………… 118  
クラススイッチ…………… 167  
グラム陰性菌…………… 153  
グラム陽性菌…………… 153  
クリック反応…………… 77  
クロノケミカルバイオロジー… 102  
グローバルドッキング…………… 138  
クロマチン…………… 123  
クロマチン調節因子…………… 123  
クロマチンリモデリング因子… 124  
クロマトグラム…………… 56

## け

- 経口投与薬…………… 90  
ゲノミクス解析…………… 6, 48, 71  
ゲノム編集…………… 7, 185  
ゲノムワイド関連解析…………… 49  
ケミカルスペース…………… 209  
限定分解…………… 229

## こ

- 抗菌薬…………… 152  
構造解析…………… 82  
構造解析支援…………… 112  
構造活性相関…………… 34, 77  
構造最適化…………… 152, 153  
構造生物学…………… 25  
構造展開…………… 33  
抗体依存性細胞傷害…………… 164  
抗体医薬…………… 164  
抗体作製…………… 165  
抗体バンク…………… 170  
抗体薬物複合体…………… 164, 165  
コンジュニック化…………… 187

## さ

- サーマルシフト法…………… 61  
三次元培養…………… 46

## し

- 時間育薬…………… 102

時間創薬…………… 102  
 次世代シーケンサー…………… 48  
 疾患標的分子の網羅的探索…………… 6  
 疾患モデル動物…………… 192  
 質量スペクトル…………… 56  
 質量分析…………… 55  
 シトクロム P450 …………… 99  
 シミュレーション…………… 143  
 修飾塩基…………… 42  
 十二指腸…………… 94  
 縮合剤…………… 157  
 消化管幹細胞…………… 92  
 消化管吸収率…………… 90  
 小腸…………… 94  
 小腸アペイラビリティ…………… 93  
 ショーケース…………… 224  
 ショットガンプロテオミクス…………… 57  
 新型コロナウイルス…………… 107, 116  
 シングルセル RNA-seq 解析…………… 49  
 シングルセルオミクス解析…………… 63  
 シングルセルプロテオミクス…………… 61  
 シングルセル・マルチオミクス解析…………… 69  
 人工染色体…………… 193  
 人工知能…………… 143  
 心収縮時のエネルギー効率…………… 182  
 深層学習…………… 139, 143  
 心不全薬…………… 179  
 腎保護薬…………… 100

**す**  
 スコアリング…………… 139  
 スーパーコンピューター…………… 7, 111  
 スクリーニングカスケード…………… 37, 38  
 ステム…………… 130  
 スバイクタンパク質…………… 119  
 スフェロイド…………… 92  
 スプライシングバリエント…………… 188

**せ**  
 生成 AI …………… 147  
 生物活性化合物の標的分子同定…………… 75  
 セクレトーム解析…………… 58  
 全合成法…………… 151  
 全身性エリテマトーデス…………… 229  
 セントロメア…………… 125

**そ**  
 相関構造解析…………… 19  
 走査型電顕…………… 105  
 相補的塩基対…………… 130  
 創薬エコシステム…………… 208  
 創薬シーズ…………… 28  
 創薬シード…………… 150  
 創薬モダリティ…………… 7, 172  
 創薬リード…………… 150

**た**  
 ターゲットバリデーション…………… 5  
 代謝酵素…………… 89  
 体内動態…………… 35  
 体内時計…………… 98  
 ダウン症…………… 196  
 タンパク質間相互作用…………… 172  
 タンパク質-タンパク質相互作用…………… 7, 140  
 タンパク質単粒子構造解析…………… 112  
 タンパク質の構造解析…………… 26  
 タンパク質複合体…………… 172  
 タンパク質分解誘導薬…………… 172  
 単粒子解析…………… 25, 26, 119  
 単粒子像解析法…………… 105  
 単粒子トモグラフィ…………… 119

**ち**  
 中分子…………… 7  
 中分子医薬…………… 129, 157  
 長鎖ノンコーディング RNA …… 51

**つ・て**  
 ツール化合物…………… 39, 146  
 低分子創薬…………… 207  
 定量プロテオミクス…………… 57  
 デコイ核酸…………… 131  
 テトラループ/テトラループレセプター RNA …………… 133  
 デュシェンヌ型筋ジストロフィー…………… 198  
 天然物…………… 7, 150

**と**  
 透過型電顕…………… 105  
 透過係数…………… 90  
 凍結グリッド…………… 108  
 疼痛…………… 226  
 時計遺伝子…………… 98

ドッキング計算…………… 138  
 トモグラフィ法…………… 106  
 ドラッグデリバリー…………… 60  
 トランスクリプトミクス…………… 71  
 トランスクロモソミックマウス…………… 193  
 トランスポーター…………… 59, 89, 229  
 トリソミー…………… 196

**な・ぬ・の**  
 内部ループ…………… 130  
 スクレオソーム…………… 124  
 脳腫瘍…………… 59  
 ノンコーディング RNA …………… 73

**は**  
 バーチャルスクリーニング…………… 21, 207, 208  
 バイオアペイラビリティ…………… 36  
 バイオマーカー…………… 55, 57  
 ハイブリドーマ…………… 164, 165  
 パイロット合成…………… 204  
 橋渡し研究…………… 215  
 白血病…………… 52  
 パブリックライブラリ…………… 209  
 バルジ…………… 130  
 半合成法…………… 151  
 パンデミック対策…………… 120  
 反応剤…………… 157

**ひ**  
 微小組織の採取…………… 70  
 光親和性標識法…………… 75  
 ヒストン…………… 124  
 ヒストンシャペロン…………… 124  
 ヒストン修飾…………… 124  
 ヒストンバリエント…………… 124  
 非相補的塩基対…………… 131  
 ビタミン A…………… 101  
 ヒット化合物…………… 21, 32, 207, 208  
 ヒト化抗体…………… 167  
 ヒト化マウス…………… 190  
 ヒト化モデル動物…………… 192  
 ヒト化モデルマウス…………… 7  
 標的プロテオミクス…………… 57  
 標的分子…………… 200, 201  
 ビルディングブロック…………… 201  
 ビルドアップライブラリー戦略…………… 151

<b>ふ</b>	
プライマリーヒット	33
フラグメント分子軌道法	144
プロテオミクス	6, 42, 55, 71
プロドラッグ	91
分化誘導療法	172
分岐構造	130
分子シミュレーション	7
分子置換法	134
分子動力学	144
分子標的薬	59
分子力場	143
<b>へ</b>	
ヘアピンループ	130
ペプチド	38, 173
ペプチド医薬	157
ペプチドグリカン	152
ペプチドの環化	158
<b>ほ</b>	
補体依存性細胞傷害	164
ポリミキシン	154
<b>ま</b>	
マイクロED法	106
マイクロフロー合成	158
マイクロフローペプチド合成	158
マイクロ流路によるバーコーディング法	65
マウスバンク	188
マルチオミクス解析	51, 69
マルチプレックス smFISH	66
慢性炎症	227
慢性腎臓病	98
<b>み・め</b>	
ミトコンドリア ATP 動態	180
メタボロミクス	42, 72
メディシナルケミスト	5
免疫グロブリン	196
免疫沈降	61
<b>も</b>	
モザイク	186
モダリティ	64
モノクローナル抗体	164, 196
<b>や・よ</b>	
薬剤耐性菌	152

薬物相互作用	91
薬物動態	44, 89
薬物動態・安全性試験	194
薬物動態ヒト化モデル動物	192
薬物の中枢移行	195
薬用植物	102
薬効評価モデル	6
予測 AI	147
<b>り</b>	
リード化合物	21, 33, 207, 208
リピドミクス	42
量子化学	7
量子化学力場	148
量子力学	143
<b>れ・ろ・わ</b>	
レチノール	100
ローカドッキング	138
ワクチン	116

## 欧文

<b>A</b>	
ACE2	119
ADC	164
ADCC	164
ADME	21, 233
ADMET	5
Affinity-Selection MS	38
AI	7, 139, 143
AIによる医薬品設計	147
AlphaFold2	137
AMED-BINDS	110
ATP	178
ATP感受性バイオセンサー	179
ATP動態イメージング	178
<b>B</b>	
BINDS	3, 18, 26, 40
bioorthogonal官能基	77
BSL3	117
BSL3クライオ電子顕微鏡	120
<b>C</b>	
Caco-2細胞	90
CAR-T	52, 165
CBIS法	165
CDC	164
ChemTS	140
CKD	98
clickable光親和性標識プローブ	77
complex <i>in vitro</i> model	95
COVID-19	30
Cryo-EM	25
Cryo-ET	118
Cryo-FIB	119
CYP	99, 194
CYP3A	93, 194
<b>D</b>	
DDA	57
DEL	201
DIA	42, 57
DMD	198
DNA-encoded library	8, 201
Dystrophin	198
<b>E</b>	
EchoMS	38
eQTL	53
<b>F</b>	
FBDD	19
Fc融合法	83
fine mapping	53
FMO法	144
<b>G</b>	
G0s2	100
GLP	44, 45
GO-ATeam	179
GPR68	101
GTE <sub>x</sub>	53
GWAS	49, 229
Gタンパク質共役受容体	101
<b>H</b>	
Hit to Lead	20, 139, 207, 233
HPV	225
<b>I</b>	
IC <sub>50</sub>	28, 36
IFN-I	230
<i>in silico</i> SBDD	136
<i>in silico</i> スクリーニング	5, 137, 144
<i>in vitro</i> ADMET評価	44

- iPS細胞 ..... 225  
 IVIVE ..... 90
- J**・**L**
- J-PUBLIC ..... 43, 208  
 LC-ESI-MS/MS ..... 56  
 lncRNA ..... 51, 129  
 LSD1 ..... 172
- M**
- MDR1 ..... 195  
 MD 計算 ..... 140  
 microphysiological system ..... 95  
 MOA ..... 222  
 MPS ..... 95  
 mRNA ..... 129  
 mRNA 医薬品 ..... 131  
 mRNA ワクチン ..... 131  
 MS/MS ..... 56
- N**
- NGS ..... 201  
 NMR ..... 25, 105
- P**
- P2C 法 ..... 140
- PDB ..... 25, 105  
 PDC ..... 42  
 PDX ..... 42  
 photo-isolation chemistry ..... 66  
 PIC ..... 66  
 PLIF 法 ..... 139  
 POC ..... 34, 223  
 PPI ..... 172  
 PPI 阻害薬 ..... 172  
 pre-mRNA ..... 129  
 PROTAC ..... 38, 172, 200, 201  
 Protein Data Bank ..... 25, 105
- R**
- RME ..... 160  
 RNA-seq 解析 ..... 49  
 RNA スプライシング ..... 224  
 RNA ポリメラーゼ II ..... 127  
 Rule of 5 ..... 210
- S**
- SaMD ..... 219  
 SAR ..... 34  
 SARS-CoV-2 ..... 107, 116  
 SBDD ..... 19, 35, 136
- SGLT2 阻害剤 ..... 179  
 single nucleotide variant ..... 188  
 siRNA ..... 131  
 SLC ..... 228  
 SLE ..... 229  
 SMILES ..... 147  
 solute carrier family ..... 228  
 structure-based drug design ..... 136
- T**
- target engagement ..... 232  
 TCA 回路 ..... 232  
 TGF- $\beta$  1 ..... 100  
 translational research ..... 215
- U**・**V**・**W**
- UGT2 ..... 195  
 VHH 抗体 ..... 108  
 warhead ..... 201
- X**
- X 線結晶構造解析 ..... 25, 26  
 X 線結晶構造解析法 ..... 105