

# 索引

## INDEX

### 数字

1 : 1 結合モデル	133
<sup>1</sup> H- <sup>15</sup> N HSQC	93
3CL メインプロテアーゼ	265
3CL 様メインプロテアーゼ (3CLM <sup>PRO</sup> )	252
5-HT <sub>2B</sub> 受容体	72
<sup>19</sup> F フラグメントスクリーニング	86, 87

### 欧文

#### A ~ D

ABINIT-MP	258, 262
Additional maps	279
Affinity	9, 34
AgTx2	329
AI (artificial intelligence)	354, 355
AI 解析	270
AlphaFold	13, 212, 214, 356
AlphaFold2	13, 212, 214, 356
AM1-BCC 電荷	262
ATSAS	317
ATTED- II	276
AUC	182, 332
Avidity	37
BCR 遺伝子	104
binding level (結合量) スクリーニング	36
BioSAXS	313
BioStation Viewer	263
BLI	13, 49, 148
BS3	302
B 細胞	104, 108
B 細胞受容体遺伝子	104
CapF	27
CASP14	214
cDNA 合成	109
CDR	124, 126
CH/ $\pi$	265
chain shuffling	126
ChEMBL	283
cheminfo.org	283
CORAL	319
CRY SOL	317
C 値	140
DAMMIN	318

DAPHNIS (diverse application platform for hard X-ray diffraction in SACLA)	309
diffraction before destruction	306
DJ-1	27, 62
DL (deep learning)	202, 354, 355
DLS	102, 172
DMSO	23, 44, 59
DOI	282
DrugBank	283
DSC (differential scanning calorimeter)	190
DSF (differential scanning fluorimetry)	18, 51, 192
DSSP	218

#### E ~ L

EMPIAR	300
EOM (ensemble optimization method)	319
error-prone PCR	120, 122, 124
ESI (electrospray ionization)	344
Fab	118, 299
FASTA 形式	216
FBDD	19, 86
Fc 受容体	168
FLaSH	80
FMO (fragment molecular orbital)	258
FMO2 法	259
FMODB	268
FMODD	263, 268
FMO 創薬コンソーシアム	263, 268
FP (fluorescence polarization)	19
GAFF	262
Gibbs 自由エネルギー変化	136
GraFix	298
GRIPS	300
G 因子	78
HCD (higher energy collision induced dissociation)	162
HDX-MS (HDX-mass spectrometry)	101, 160
HDX 法 (hydrogen/deuterium exchange method)	160
HHpred	212
HIV プロテアーゼ阻害剤	12, 58
HPLC	183, 321
IFIE (inter-fragment interaction energy)	258, 259
IFIE-sum	259
IgG	299
<i>in silico</i> 解析	13
<i>in silico</i> スクリーニング	13, 19, 235
<i>in silico</i> 創薬	13, 258
in-tandem アッセイ	153
input cfu	124
ITC (isothermal titration calorimeter)	19, 58, 101, 136

Kai タンパク質	325
KcsA	327
K <sub>D</sub>	46, 83, 133, 187, 297, 342, 346
KEGG DRUG	241, 283
KEGG データベース	277
Kinetics	34
KNAPSAck Family	283
KSI	61
LALLS (low angle laser light scattering)	183
Lamm 方程式	333
LCP	308
LigandBox	241, 283
LINC	354
LOD (linked open data)	356
L-アルギニン	170

#### M ~ R

Masks	279
MD (molecular dynamics)	259, 359, 360
MD 法	259
MF myPresto	236
MgtE	330
MicroCal PEAQ-DSC	195
MicroCal VP-Capillary DSC	192, 193, 194
ML (machine learning)	354, 355
MODELLER	220
MOE	260
MOL	239
mol2	239
MolDesk	236
Møller-Plesset 二次摂動	262
Motif dock score	231
MP2	262
Mpro	265
MST (micro scale thermophoresis)	19, 66
myPresto	236
<i>m/z</i>	163, 346
N3 ペプチド模倣阻害剤	252
Nanodisc	72
Nano DSC	192, 193, 194
Native-MS (native mass spectrometry)	102, 342
native SAD 法	293
NBDC・生命科学系データベース アーカイブ	241, 283
NMR 共用プラットフォーム	88
output cfu	124
p38 MAP キナーゼ	264
PAINS	32, 46
PCA (principal component analysis)	266
P-cadherin	29
PCR	104, 120
pD	165
PDB (Protein Data Bank)	215, 237, 260, 279, 294, 317

PDBx/mmCIF	237
pdb ファイル	249
pH スカウティング	42, 53, 151
PID 制御	324
PIEDA	259
Poisson-Boltzmann (PB) モデル	264
PoSSuM	283
Primary map	279
PSI-BLAST	222
PSI-PRED	218
PubChem	283
QSAR	356
Ramachandran プロット	294
Raw map	279
RDF (resource description framework)	356
RELION	298
RESP 電荷	262
RI 検出器	183
R <sub>max</sub>	39
RMSD	225
Rosetta	201, 229
RosettaDock	228
RoseTTAFold	226

## S ~ Z

SACLA	303
SARS-CoV-2	13, 264, 265, 278
SAS (small-angle scattering)	313
SAXS (small-angle X-ray scattering)	313
SBDD (structure-based drug design)	311
scFv	118, 145
SCIFIE	264
SDF	239
SEC	102, 170
SEC-MALS (size exclusion chromatography-multi angle light scattering)	102, 181, 182
SEC-MALS/RI 解析	321
SEC-SAXS 法 (size-exclusion chromatography-SAXS)	321
SFX (serial femtosecond X-ray crystallography)	304
SITE	61
SMILES	240
solvent correction	36, 42
SPR (surface plasmon resonance)	13, 17, 21, 32, 33, 60, 101, 128
SPRING-8	304
SPR 検出器	33
STAT2	83
SVD (singular value decomposition)	260, 265, 266, 267
SYPRO Orange	53
SYPRO Orange Protein Gel Stain	52
T <sub>2</sub> フィルター 実験	87

TAP (tandem affinity purification)	346
TAP 複合体	346
TargetMine	356
TIC (total ion current)	349
T <sub>m</sub>	192
TR-SFX (time-resolved serial femto-second X-ray crystallography)	308
UHPLC (ultra high performance liquid chromatography)	161
UniProt	215
Unmasked half-maps	279
VAST	223
XFEL	303
XL1-Blue	123
X線結晶構造解析	13, 102, 296
X線自由電子レーザー	303
X線小角散乱法	126
Z'-ファクター	23, 36

## 和文

## あ行

アカデミア創薬	50
アセンブリ	347
アディアパティックパルス	90
アナライト	34, 129
アナログ化合物	277
アビディティ	8
アフィニティ解析	9, 35
アフィニティカラム	113
アミドプロトン	161
アミンカップリング	41, 43, 133
アミンカップリング法	149
アンサンブル・ドッキング	245
安定同位体	160
イオン化法	344
イオンモビリティ分離(IMS)技術	163
一次スクリーニング	17, 18, 21, 50
一本鎖抗体	118
一本鎖抗体 Fv 断片	145
遺伝的アルゴリズム	320
移動境界面	332
イムノグロブリン軽鎖	105
イムノグロブリン重鎖	105
エピトープ	99, 102, 148
エピトープグループ	154
エピトープマッピング	154
エピトープマッピング	160, 161
エレクトロスプレーイオン化法	162
エレクトロポレーション	123, 124
エンタルピー	59, 136
エンタルピー駆動型	10
エントロピー	59, 136
エントロピー駆動型	11
円偏光二色性スペクトロメトリー	53
オートサンプラー	193

オミクスデータ	358
温度関連強度変化 (TRIC)	66
オンラインカラム	162

## か行

会合	181
会合凝集体	102, 168
概日周期	325
解析値の信頼性評価	40
回転拡散定数	78
回転相関時間	78
カイネティクス解析	22, 131
解離速度定数	133
解離定数	46, 83, 133, 187, 297, 342, 346
化学架橋	301
化学シフト	92
化学シフト摂動 (CSP) 実験	93
化学量論	334, 342, 346
化学量論比	321
拡散係数	333
化合物スクリーニング	51
化合物ライブラリー	20
ガラス化	297
ガラス状	297
カラム平衡化	184
患者層別化	358
慣性半径	126
カンチレバー	324
機械学習	354
ギニエ解析	315
ギニエプロット	316
逆交換	162
キャピラリー	348
キャプチャー法	34
キャラクタリゼーション(K <sub>d</sub> , k <sub>on</sub> , k <sub>d</sub> 算出)	36
吸着等温線	342
キュービックフェーズ法	308
凝集体	181
協同的結合	327
共発現遺伝子群	275
クローンポテンシャルマップ	280
クエンチング	166
串刺し検索	270
クライオ電子顕微鏡	13, 102, 296
クライオプロテクタント	289
クライオルーブ	288
クラツキー解析	316
クラツキープロット	316
クリスタルパッキング	313
グリッド	297
グローバルドッキング	228
グロー放電	297
クロス競合アッセイ	149
クロスバリデーション	11
クロマチンリモデリング複合体	301
蛍光異方性	76



滴定曲線	140
デコンボリューション	137, 350
デフォーカス	300
電子移動解離 (electron transfer dissociation: ETD)	162
電子直接検出器	300
天然変性タンパク質	319
等温滴定型カロリメトリー	352
等温滴定型カロリメーター	19, 58
等温滴定型熱量計 (ITC)	19, 58, 101, 136
等温滴定型熱量測定	126
透過型電子顕微鏡	299
統合構造生物学	322
動的光散乱法 (DLS)	102, 172
特異性	8, 102
特異値分解	260
特異的結合	39
ドッキング計算	102, 200, 204, 207, 227, 230, 359
ドッキングスコア	235
ドッキングソフト	235
ドラッグデリバリーシステム	343
ドラッグリポジショニング	273
トラップカラム	162
トランスフェクション	112, 115

## な行

ナノディスク	330
二次元平均像	300
二次構造	217
二次構造予測	225
二次スクリーニング	17
熱安定性	126
熱安定性解析	50
熱泳動	66
熱力学	10, 58
熱力学的パラメーター	11, 12, 137

## は行

バーチャルスクリーニング	303
バイオセンサー	148
バイオペニング	118, 119
バイオレイヤー干渉法 (BLI)	13, 49, 148
ハイブリドーマ法	104
発現ベクター	111
バリエーションデータ	274
バリデーション	58
反応速度論	296
ビームタイム	291
ビームライン	291
ビオチン-ストレプトアビジン	107
ビオチンタグ	41
光遮蔽法 (LO)	102
ビッグデータ	269
ヒット化合物	246
非特異的結合	39

標準母液	288, 290
標的分子	237
氷包埋	296
氷包埋試料	297
表面相補性	242
表面プラズモン共鳴 (SPR) 法	13, 17, 21, 32, 33, 60, 101, 128
ファージディスプレイ法	100, 117, 119
ファージベクター	120
ファージミドベクター	120
ファンデルワールス相互作用	255
フィードバック電力	141
フェノタイプアッセイ	12, 16
フェムト秒	304
不均一性	347
不溶性微粒子試験	169
ブラウン運動	172
フラグメント化	163
フラグメント間相互作用エネルギー	258
フラグメントスクリーニング	62
フラグメント分子軌道法	258
フラグメントライブラリー	30, 60, 202
ブランク測定	198
ブリッカーサーイオン	346
プリユースター角	83
プレコンセントレーション	42
フローイメージング法 (FI)	102
フローサイトメトリー	104
プロダクションラン	251
プロテアソーム	327
プロテオーム解析	273
プロトン化状態	249, 261
プロファイル	213
プロファイル比較	213
分散力	258, 259
分子間相互作用	74
分子間相互作用パス	272
分子質量計測	187
分子シミュレーション	282
分子動力学計算	247, 360
分子動力学 (MD) シミュレーション	247, 249
分子動力学法	259
分子力学-一般化ボルン溶媒表面積 (MM/GBSA)	248
分子力学-ボワソン-ボルツマン表面積 (MM/PBSA)	248
分子力場	249
分析超遠心	182
分離カラム	162
平衡化	251
平衡値解析	46, 48
ベースライン	38
ベースラインの安定性	37
ヘルパーファージ	120
偏光度	77
変性エンタルピー	191, 196
変性中点温度	191, 196

偏比容	334
放射線損傷	306
ポーズ	244, 246
ホモロジーモデリング	260, 277

## ま・や行

マイクロスケール熱泳動法	19, 66
膜タンパク質	66, 327
麻疹ウイルス	85, 264, 266
マストランスポートリミテーション (MTL)	37
マルチサイクルカイネティクス (MCK)	34, 131
マルチプルシーケンスアライメント (MSA)	213
未診断疾患イニシアチブ	273
ミスセンスバリエーション	275
水分子の分子力場モデル	250
密度勾配超遠心	301
メインプロテアーゼ	264
メタボローム解析	273
モデル構築	292
モノクローナル抗体	104, 105, 128, 271
焼なまし法 (simulated annealing)	318
ヤブロンスキーダイアグラム	75
誘導適合	10
誘導適合モデル	329
溶液 NMR 法	86
溶液効果 (bulk effect)	133
溶媒交換	344

## ら行

ライフィントリジェンスコンソーシアム (LINK)	354
らせん対称平均化法	279
ラベルフリー	194
ランダム散乱光	83
リード化合物	246
リガンド	33, 43, 129
リガンド-タンパク質相互作用	74
立体構造予測	102, 203, 212
リトナビル	252
リファレンスセル	137
粒子間干渉効果	315
粒子ピックアップ	300
リレーションナルテーブル	281
リン酸化	325
ループ構造	203
ループ構造予測	206
励起状態	74
レイリー散乱光	83
レイリー比	183
連続フェムト秒結晶構造解析	304
ローカルドッキング	228, 230
ロータマライブラリー	228
ロピナビル	252