

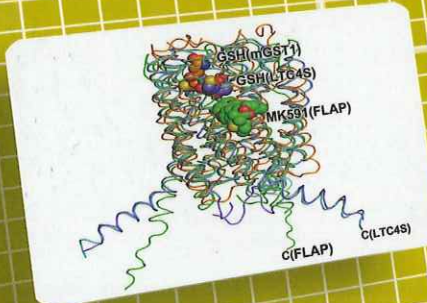
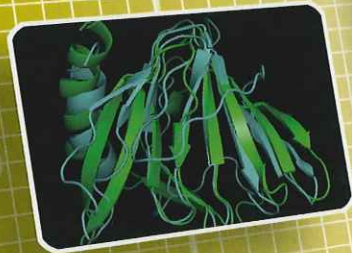
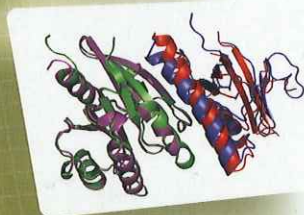
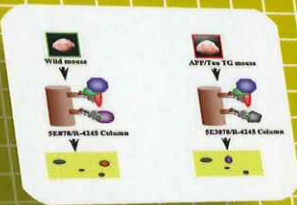
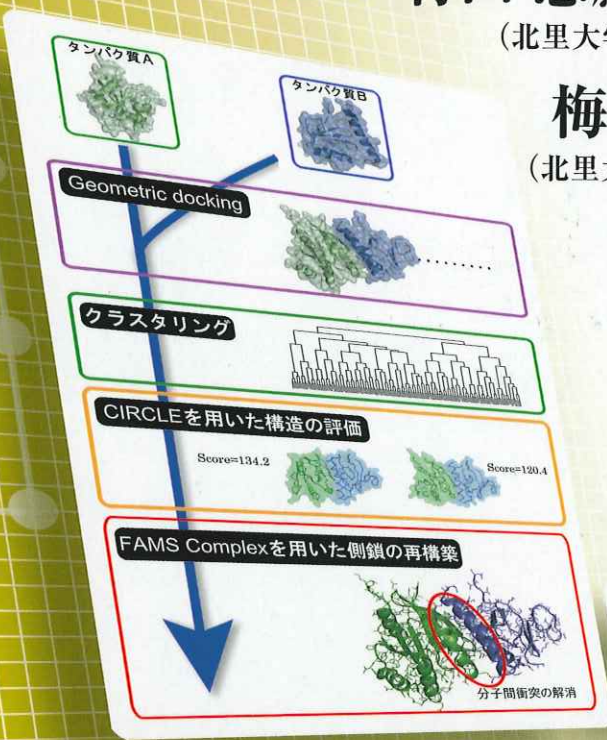
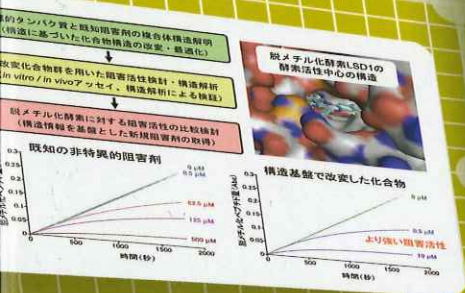
次世代創薬テクノロジー 実践:インシリコ創薬の最前線

【編集】 竹田-志鷹真由子

(北里大学薬学部准教授)

梅山 秀明

(北里大学薬学部教授)



次世代創薬テクノロジー 実践：インシリコ創薬の最前線

目次

編集：竹田 - 志鷹真由子（北里大学薬学部准教授）
梅山 秀明（北里大学薬学部教授）

巻頭 Color Gravure	4
●序文	20
竹田 - 志鷹真由子・梅山秀明	

第1章 インシリコ創薬進展に向けた次世代創薬基盤技術

1. インシリコ創薬に関わるタンパク質の結晶構造解析	28
梅原崇史・横山茂之	
2. モデルから直接標的タンパク質構造へ：SBDD 創薬をめざした 脂質構造生物	34
宮野雅司・吾郷日出夫・堀 哲哉	
3. タンパク質立体構造予測	
1) Template Based Modeling	43
竹田 - 志鷹真由子・寺師玄記・加納和彦・梅山秀明	
2) <i>de novo</i> モデリング	49
中村周吾・清水謙多郎	
4. タンパク質複合体の立体構造予測	55
竹田 - 志鷹真由子・寺師玄記・加納和彦・梅山秀明	
5. 立体構造情報からのタンパク質機能予測：現状と展望	60
木下賢吾	
6. 人工タンパク質設計の創薬への展開	66
磯貝泰弘・太田元規	
7. 新規創薬ターゲット探索を志向したケミカルジェネティクス - 生理活性 物質との相互作用に基づく創薬ターゲット探索 -	71
田中明人	
8. Fragment-Based Drug Discovery とインシリコ技術	78
田中大輔	

9. 高精度なタンパク質 - リガンド相互作用解析に向けて	
1) フラグメント分子軌道法によるタンパク質 - リガンド複合体の相互作用解析とアフィニティ計算	84
	仲西 功・北浦和夫
2) インシリコスクリーニングの精度向上に向けて	90
	福西快文
3) コンセンサススコアリングを用いたタンパク質 - リガンドのドッキング (インシリコ創薬効率化に向けた高精度スコアリング法の紹介)	95
	寺本礼仁・福西広晃
4) 相互作用ライブラリーに基づく集約評価関数を用いたタンパク質 - リガンドドッキング	100
	高谷大輔・竹田・志鷹真由子・梅山秀明
10. 創薬現場の実際：立体構造に基づく高選択性凝固第VII a 因子阻害剤の創製	106
	大田雅照
11. QSAR 研究の最前線	112
	吉田達貞・中馬 寛
12. NMR を用いた創薬研究とライフサイエンス企業における NMR	117
	榛葉信久

第2章 創薬インフォマティクス

1. 構造・機能バイオインフォマティクスの新規創薬への応用	124
	水口賢司
2. 包括的トランスクリプトーム解析からの創薬	129
	辻本豪三
3. ケミカルゲノミクス情報に基づく創薬	134
	奥野恭史
4. ゲノムワイドなタンパク質 - 化合物相互作用の統計的予測	140
	榊原康文
5. ケミカルプロテオミクスによるタンパク質 - 化合物相互作用とタンパク質間相互作用の解析	144
	青島 健・小田吉哉

6. インシリコ ADMET 予測から並列創薬への展開：インシリコ ADMET 予測の現状と今後の創薬への展望	155
	湯田浩太郎
7. 創薬インフォマティクスの今後の展望	162
	白井宏樹

第3章 創薬に向けた生命情報の統合

1. KEGG とゲノムネットにおける医薬品と生命情報の統合	168
	五斗 進・金久 實
2. パーソナルゲノム時代の創薬	175
	館野義男・古江基樹・五條堀 孝
3. オミックス情報を基盤にした創薬	180
	田中 博
4. 薬理ゲノミクスネットワーク解析による次世代創薬科学	186
	田中利男・西村有平・島田康人
5. テーラーメイド医療をめざした疾患感受性遺伝子のゲノムワイド探索	191
	西田奈央・徳永勝士
6. 創薬研究のためのライフサイエンスネットワークキングシステム (理研サイネス)	196
	豊田哲郎
7. 生体分子の熱力学データと構造データの統合	204
	皿井明倫
索引	210