



## In Silico Drug Discovery and Design : Theory, Methods, Challenges, and Applications

edited by Claudio N. Cavasotto ; electronic bk.. -- CRC Press,  
2015.

REVIEWER

医学部医学科2回生

### 計算機による創薬の概説

薬剤の発見や設計に計算機を用いるのが有用であろうことは、容易に想像がつく。実際、世界中の製薬会社が開発した薬剤はデータベース化されており、そのビッグデータの中から標的タンパク質に結合するリガンドを探し出すには計算機によるスクリーニングが本質的である。また、標的タンパク質とリガンドとの結合は物理現象であるが、それを記述する方程式は高度に非線形であるため、計算機による解析が不可欠である。しかしながら、計算機による創薬の過程は自明でない。この全体像および詳細はどのようなものなのか、また、この分野はどこへ向かっているのか。非常に気になるところである。

本書は、そういった質問に対して大まかな答えを与えてはくれる。詳細は本書を読んでいただきたいが、およそ、データベースから化合物の候補を大雑把に抽出する際に情報科学が用いられ、その候補をさらに絞り込む際に物理学が用いられる、というものである。しかし残念ながら、本書はその方法論のテクニックに主な焦点を当てており、基礎や原理についてはそもそも説明するつもりがないと感じられる。

たとえば、化合物の候補を絞り込む際に、標的タンパク質と化合物との結合によるギブス自由エネルギーの変化を数値的に計算するが、その基礎の説明はお粗末である。つまり、タンパク質の三次構造の物理的性質をモデル化する分子力場の説明は片手落ちだし、分子を量子力学的に扱う分子軌道法に至っては概念的な説明すらない。ただ、参考文献は豊富なので、詳細はそれらを参照せよということなのだろう。

(裏へ続きます)



電子ブック

⇒⇒⇒

恐らく、本書は研究者向けのレビューとして捉えるのが正しい。ただ、素人目ながら本書から読み取れるのは、情報科学や物理学の使い方を改良するという地道な仕事こそがこの分野の現状である、という点であり、そして、計算機による創薬にはなお多くの困難があり、何らかのパラダイムシフトが必要である、という研究者の共通認識である。本書は、創薬の基礎を理解するための手引きとして用いるには不適切かもしれないが、創薬研究において特定の疑問を持ったときに紐解くと、得るものは大きいと思われる。

受理：2017-03-29