

有機合成化学と計算化学の融合による創薬：どうして私は計算化学を活用できないか？

夏苺 英昭（東京大学大学院薬学系研究科）

従来，創薬は伝統的な有機合成化学と生物学（薬理学）の緊密な連携のもとに進められ，一つ一つの薬を手づくりの感覚で創出してきた．これに対して、近年のゲノム科学や IT の急速な進歩は，コンビナトリアルケミストリー，ハイスループットスクリーニング，コンピュータ支援によるドラッグデザイン，あるいは *in silico* スクリーニングといった新技術を伴い，これまでの創薬研究の流れに大きな影響を与えつつある．確かに効率的なリード化合物の発見・最適化研究には，これら新技術と従来の手法との融合が必要であろう．しかし，現在の有機合成化学者は，この進歩したコンピュータ科学を基にして得られる計算化学や構造生物学の情報を本当に理解し，創薬へ活用しているだろうか？講演では創薬研究に携わる有機合成化学者が抱く計算化学への期待と想いを述べてみたい．