

27D-pm09S

構造活性相関と分子構造の理解における 3D アニメーションの有効性の検討

○中谷 明嗣¹, 松野 純男², 大星 直樹¹ (¹近大院総理, ²近畿大薬)

【背景】薬学部では医薬品の作用を学ぶ際に、その薬理作用とともに構造式を学習し、構造活性相関を元に薬品の作用・副作用を予測するスキルを身につける。特に薬剤と標的分子との相互作用においては、構造を空間的に把握することで、より深い作用の理解につながると考えられる。しかし、構造式は紙上で平面的に記述されているため、立体である分子構造を類推するには習熟を必要とし、学生の構造活性相関への理解を十分に向上させられていないのが現状である。

【目的】近年の情報技術の発達により、3D ディスプレイや 3D プリンタを用いることによって、複雑な立体構造を容易に表現できるようになった。そこで、本研究では 3D ディスプレイを活用して分子構造を立体的に認識させるシステムを構築し、それを用い医薬品に関する 3D アニメーションを見せることで、学生の医薬品の構造に対する理解度を深めることが可能かをアンケートによって検証した。

【方法】モデルとして抗癌剤であるドキソルビシンと DNA の結合に関する 3D アニメーションを作成した。薬学部学生を対象に 3D アニメーションを見た前後での、空間的構造把握に関する理解度の変化をアンケートにより解析した。

【結果・考察】アンケート調査の結果、紙上での構造の説明時と比較して、3D を見た後の薬物の立体的構造に対しての理解度は向上していた。他方、構造と薬理作用の相関を意識するといった答えは少なかった。3D ディスプレイを用いた医薬品の作用の 3D アニメーションは立体構造の理解度の向上に有用であるとの評価が得られた。今後はさらに多くの医薬品について 3D コンテンツを拡充する予定である。