

一般シンポジウム S21

戦略的 *in silico* 手法の活用で医薬研究開発の手詰まり状態を打破する Strategic *In Silico* Approach to Overcome Drug Development Stalemate

平山 令明¹

¹東海大糖鎖科学研究所

ヒト・ゲノムの解読宣言がされてから、約 10 年が経過した。しかし、多くの期待に関わらず新薬開発の速度が格段に加速した印象はなく、むしろ医薬研究開発には大きな手詰まり感があるのが現状である。標的分子の三次元構造に基づいた合理的な分子設計法の成功に代表されるように、*in silico* 技術は医薬開発の効率化に大きく貢献して来たが、その応用は限定的であった。一方、医薬研究開発において注目すべき因子は益々複雑化しており、医薬開発研究の各過程における意思決定を難しくしている。*in silico* 技術はこれらの問題を解決する上で極めて有用である。即ちこの技術をより広範かつ戦略的に活用することで、医薬研究開発全体のスループットを向上させるだけでなく、人類にとって貴重な資源である医薬分子の十分な活用を図る道を開くことが可能になると期待される。本シンポジウムでは、まず医薬分子の発見・創出および有効活用に関する現在の諸問題を概観し、*in silico* 手法の戦略的適用がそれらの問題をどのように解決し得るかを、リポジショニング、ポリファーマコロジー、オフ・ターゲット、タンパク質間相互作用解析および毒性予測等の具体的なトピックスについて議論する予定である。