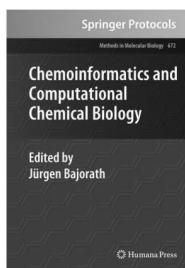


RECENZE



Jürgen Bajorath (ed.):
**Chemoinformatics
and Computational Chemical
Biology (Methods in Molecular
Biology 672)**

Vydal Humana Press Inc., 233 Spring
Street, New York, U.S.A., 588 stran,

pevná vazba, cena: 159 \$.

ISBN: 978-1607618386

Recenzovaná publikace představuje 2. svazek série věnované chemoinformaticce – mezioborové vědecké disciplíně aplikující počítačové postupy na problémy organické chemie, mezi něž patří např. ukládání chemických struktur a následné strukturální, podstrukturální či podobnostní vyhledávání, návrh nových sloučenin s požadovanými vlastnostmi či predikce biologické aktivity sloučeniny pouze ze znalosti její struktury. Zatímco první svazek, publikovaný v roce 2004 pod názvem „Chemoinformatics: Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery“, představil celou řadu různých chemoinformatických metodologií zaměřených na *in silico* vývoj nových léčiv, recenzovaná publikace odráží současnou pozici chemoinformatiky jako nástroje, jehož aplikační oblast se velmi významně rozšířila o problémy tzv. chemické biologie. Chemická biologie se zabývá studiem biologických funkcí a systémů za použití malých organických molekul a má tedy vzdálenou spojitost s farmaceutickým výzkumem. Předmětem zájmu chemické biologie jsou, mezi mnoha jinými, systé-

mově orientované přístupy používající malých molekul, návrh specifických knihoven ligandů optimalizovaných pro daný molekulární cíl, studium molekulové selektivity či systematická analýza vztahů mezi ligandem a jeho molekulárním cílem, které jsou všechny diskutovány ve třetí části recenzované knihy.

V současné době jsou nedílnou součástí chemoinformatiky jak klasické, časem ověřené výpočetní postupy, tak vývoj a implementace nových algoritmů a metodik. Tato skutečnost se v knize odráží zařazením kapitol o podobnostním vyhledávání, strojovém učení, pravděpodobnostních přístupech a fragmentních metodách. Další příspěvky se pak zaměřují na vztah mezi strukturou a aktivitou látky, pochopení aktivního prostoru, popis konceptu farmakoforu, *de novo* návrh struktury ligandu, virtuální „screening“ a modelování chemických reakcí. Kniha začíná detailním úvodem do chemoinformatické problematiky a končí diskusí statistických standardů pro vyhodnocování virtuálních „screening“ experimentů, tématem velmi potřebným a relevantním.

Tato publikace obsahuje příspěvky od vůdčích vědeckých kapacit jak z akademického, tak z průmyslového prostředí, kteří pomohli formovat celý chemoinformatický obor. Více než polovina z celkového počtu 22 kapitol má charakter souborného článku, další příspěvky pak popisují jednotlivé metody nebo třídy metod. Kapitoly jsou doplněny rozsáhlou bibliografií, což ještě více zvyšuje hodnotu díla jako cenného zdroje informací nejen pro experty, ale též pro nováčky snažící se zorientovat v této tolik zajímavé vědecké oblasti.

Daniel Svozil