

(広島大院理・広島大QuLiS) 相田 美砂子

現在，計算化学を主体とした大きなプロジェクトが数多く走っている。シンポジウム『生命科学と計算化学』では，それらの中からいくつかのプロジェクトの先生方に御講演を依頼した。ソフト・ハード・概念・人材養成のさまざまな面から，生命科学の分野への計算化学からの取り組みについて持論を展開していただき，また，それぞれのプロジェクトにおける現状と将来の展望を話していただく。それに基づいて計算化学が生命科学に対して何ができるようになったのか，現段階において計算化学が生命科学をめざして何ができるのか，まだ何ができないのか，何が必要なのか，という点を明らかにしていきたい。いろいろなプロジェクトの目的や概念を一つのシンポジウムの中でまとめて何うことによって，これからのすすむべき道が見えてくる。また，より多くの研究者がこの分野に入るきっかけとなるようなシンポジウムにしたいと思っている。

量子生命科学プロジェクト研究センター (QuLiS) は，広島大学の5年間プロジェクトセンターの一つとして平成15年4月にスタートした。広島大学内の量子化学，情報科学，タンパク質科学，遺伝子科学，構造生物学，有機合成化学の分野の，有志の若手研究者と学外からの客員メンバーから構成している。「量子生命科学」は，私たちの定義では，「量子化学に則った生命科学研究」である。量子化学が生命系においても根本原理を与える，という信念に基づいて研究をすすめている。

QuLiSセンターの研究の目的は，タンパク質や核酸，またその複合体の構造や機能の予測，反応機構の予測に基づく生理活性物質の設計，理論的な予測・設計の実験による検証，その結果の予測・設計システムへのフィードバックである。単に生体高分子が計算対象である，ということでは，計算化学から生命科学へ取り組んでいることにはならない。生命系のモデルとして意味のあるモデル系をたて，そこで生体系を意識した量子化学計算をおこなうことが必要である。さらに，その計算結果を実際の生体系における観測結果と照らし合わせ，モデル系にフィードバックさせる，というプロセスが必要である。また，生体系や凝集系の場合，ある一つの local minimum の構造を非常に高い精度で求めただけでは全体像は理解できない。ある有限温度において熱エネルギーをもった状態にあるとき，ポテンシャル曲面の底の構造を求めただけでは反応がおこる方向はわからない。さらに，自由エネルギーを求めることも重要である。このようなことを意識して計算化学から生命科学にとりくんでいる。

また，QuLiSセンターを母体として，文部科学省平成15年度科学技術振興調整費新興分野人材養成「ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム」がスタートした。物質科学，生命科学，情報科学を融合した新しい領域の教育システムの確立をはかり，「カスタムメイド・ソフトウェア」をつくることのできる人材の養成をめざしている (図1)。

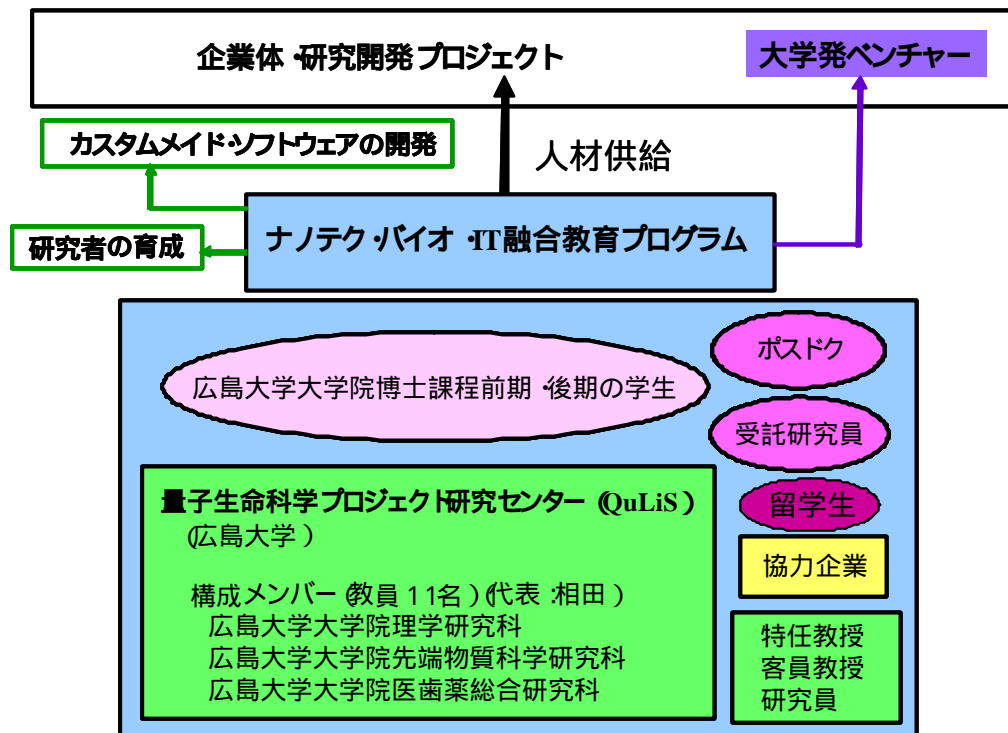


図1.広島大学における量子生命科学研究と人材養成

ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム（NaBiTプログラム）では、プログラミングが自分ででき、なおかつ、自分に必要な実験を自分ですることができる人材を養成することを目的としている（図2参照）。量子化学・計算化学だけでは出すことができない情報を他の分野における研究で得る。あるいは、実験的手段だけでは出すことのできない情報を計算機を使って出す。この両方を駆使することができて初めて、生命というものに科学が取り組むことができるようになる、と私は考えている。

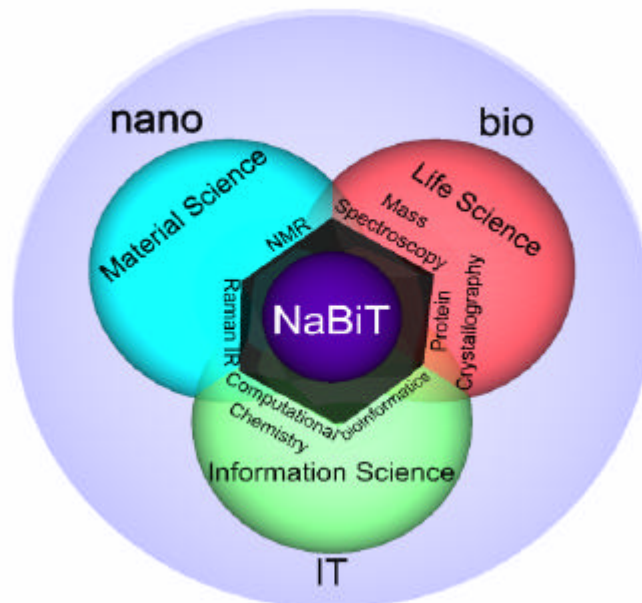


図2 . ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム（NaBiTプログラム）の概念