

## 量子化学から生命科学へのとりくみ

広島大学大学院理学研究科化学専攻  
量子生命科学プロジェクト研究センター  
相田 美砂子

平成 15 年 4 月に、広島大学に量子生命科学プロジェクト研究センターが設置された。このプロジェクト研究センターは、量子化学という化学の基本的な考え方に基づいて生命科学にアプローチする場、としての使命を持っている。

タンパク質や核酸等の生体高分子の構造や反応性を予測することができるようになるためには、また、さらには創薬をめざすためには、コンピュータケミストリー、バイオインフォマティクス、生化学、遺伝子科学、構造生物学、有機合成化学の研究者が密接に連携をはかることが必要である。そこで、そのような協力体制を推進する場として量子生命科学プロジェクト研究センターを設立した。ポストゲノムの時代を迎え、今後 10 年間に指数関数的に膨大化するプロテオミクス関連情報をどのようにして世界に先駆けて処理し、医療・食糧・環境問題に役立つ情報を抽出するのかが、最も真摯に取り組まねばならない問題である。コンピュータを駆使した手法の開発が不可欠であり、さらに実験との連携も非常に重要である。量子生命科学プロジェクト研究センターの基本は、量子化学的思考方に則ってライフサイエンスに貢献する情報を的確に抽出することが必要であるという認識である。量子化学を基礎とした支援コンピュータソフトウェアの開発と、さらに、それに基づいて実際に設計・合成をめざす研究組織を立ち上げることによって、国内外に類を見ないユニークな、ポストゲノム時代の先端をいく研究の推進をはかる。

量子化学の分野で育った私は、量子化学に基づいたシミュレーションを実行することで、生体におけるさまざまな機能を具現化する、という夢を持っている。しかし、量子化学計算を実行すれば何もかもすべて解決する、という時代はまだ来ていない。計算機能力という面でも計算レベルという面でも、まだまだ不十分である。したがって、現在すべきは、量子化学の分野と周辺の実験分野の本当の意味での融合である。そのために、量子生命科学プロジェクト研究センターという場を発展させていきたいと思っている。

量子生命科学プロジェクト研究センターは、広島大学大学院理学研究科化学専攻と同数理分子生命理学専攻の教官を中心とし、医歯薬総合研究科および遺伝子実験施設等の若手研究者と連携して構成している。学内の構成メンバーは、全員 40 歳代以下の若手（本人が思っているだけ？）である。学外からも客員教授・客員研究員をお迎えし、幅広い研究の推進をはかる。

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』が量子生命科学プロジェクト研究センターを母体としてスタートすることになった。『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』の目的は、膨大化しつつあるライフサイエンス分野の情報に対しコンピュータサイエンスを駆使して集約し、より有益な概念を抽出しうることのできる優秀な人材を養成すること、またそのような人材が育つ環境を整備することである。そのためには従来の大学に根強く残っている既成の枠にとらわれることなく、複合領域の研究者の自由な連携が必須である。そこで、量子生命科学プロジェクト研究センターが受け入れ母体となって、この新しい分野の人材養成を推進する。

『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』は、次の能力を兼ね備える人材を養成することを、養成到達レベル目標としている。

- (1) 研究開発に必要なソフトウェアを独自に開発するためのプログラミングの技能を有する。
- (2) コンピュータケミストリーとバイオインフォマティクスの両方の知識と技術を有する。

この到達目標を達成するために、基本カリキュラムとアドバンストコースの 2 段構成になっている。基本カリキュラムは、広島大学大学院理学研究科の化学専攻と数理分子生命理学専攻が連携して、物質科学系・生命科学系・情報科学系のカリキュラム群を広島大学大学院理学研究科に構成する。アドバンストコースは、広島大学量子生命科学プロジェクト研究センターにおいて、実践的な研究・開発の訓練を実施するものである。

このように、広島大学において、量子化学・計算化学に基礎をおく生命科学への取り組みが具体的な形となって始まっている。日本コンピュータ化学会とも深い関わりがある。日本コンピュータ化学会員のみなさまの厳しいご指導ご鞭撻をお願いしたいと思っている。