

宗井 陽平 むねい ようへい

比多岡 清司 ひたおか せいじ

# 創薬研究のネットワークの核として

## 試験管やフラスコのなき研究室

医学部系の研究室とえば、今までの取材では、実験機器や材料でこた返しているというイメージがありました。中馬先生が訪れてびっくり。どの机の上にもノートパソコンと書籍や資料だけ。実験室の中にもパソコンが並んでいるだけです。まるで普通の会社の事務室のような光景。はて、薬の研究や実験は？

実はこの研究室では、計算化学・情報化学に基づいて、薬とタンパク質の相互作用などをコンピュータ上でシミュレーションしているのです。

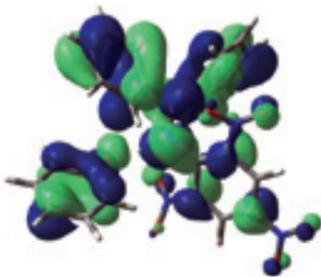
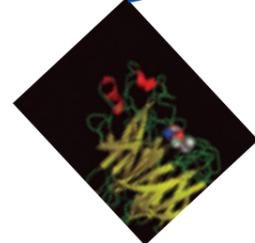
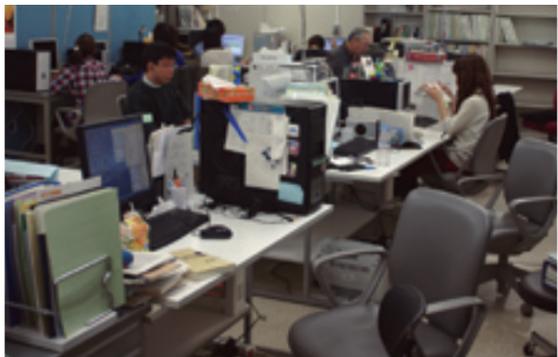
もとより薬学の研究の多くは、肉眼では見えないような、ミクロの世界です。そのために実験には、高度かつ高価な専門の測定器や器具が必要であったり、長い時間と人間の忍耐力やオーバーワークも

要求されます。

そこで、近年の著しいコンピュータの演算能力の向上と物理化学理論の発展に伴い、理論を武器として、並列コンピュータを使い、目に見えない世界をシミュレーションする方法が用いられているのです。ただしあくまでも仮定。仮説の世界。コンピュータの導くものが完全なものでないことは承知の上です。使用するアプリケーションソフトによって、結果が違う場合もあります。しかしながら、これによって省かれる時間や経費、人の労力は大きなものです。また逆に実際の実験を理論的に裏付けていくという意味もあります。

## 仮想世界と現実世界を繋いで

宗井さんは、例えば緑内障やて



んかんの治療に用いられる薬が体内の酵素にどのように作用してタンパク質に影響を与えているかといった、酵素と薬の相互作用についての実験を、理論的に裏付けていくことに取り組んでいます。

「すでに実際の実験では研究の進んでいる分野ですが、炭酸脱水酵素のように金属原子を含んだタンパク質はシミュレーションが難しいという特徴が見られますので、それに注目して解析しています」と説明されても、専門外にはわかりませんが、まさしくこのようなことはスーパーコンピュータならではの研究結果だと言えるでしょう。

比多岡さんは、新型インフルエンザの研究をしています。

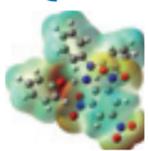
「タイムリーなものなので、情報量も多いのですが、逆に様々な情報が入り乱れ、多すぎますので取捨選択も大事になってきます」薬がウイルスのどの部分とどのよ

うな相互作用により効いているかをつきとめることができれば、薬に抵抗を示す薬剤耐性ウイルスや新しいウイルスの出現時により効果的な薬を合理的に開発できるでしょう。

比多岡さんは、コンピュータによる解析の限界と課題も指摘しています。

「シミュレーションの結果を実際の実験に反映させ、またその結果に基づいてシミュレーションするといった、他の研究室との連係が大事だと思います」

## 自由な雰囲気の中で



もくもくとコンピュータ端末に向かう研究室。

「二人に一台のパソコンとデスク。実験器具もなく余裕のある室内。良い意味で静かな研究室です。実験をしないので、時間もたくさんあります」

と、宗井さん。忘年会や中馬先生の誕生会、気が向けば誘い合わせて飲み会に。スペースだけでなく、雰囲気も自由で開放感があります。比多岡さんは中馬先生について、「好奇心旺盛で、専門外の文化や芸術にも積極的に興味を持ち、とても博学です。研究も自由にやらせてくれますが、月に一度のディスカッションでは、ずばっと的確に指示してくださいます」



yohei munei

seiiji hitaoka

大学院 薬科学教育部  
博士前期課程1年  
宗井 陽平 むねい ようへい  
▲左  
▼右  
大学院 薬科学教育部  
博士前期課程2年  
比多岡 清司 ひたおか せいじ

