

まえがき

本書は、物質科学に関する物理学・化学の知見を基礎として、いわゆる分子生物学の対象を理論計算的な手法で解析・記述することの初学者(ならびに異分野の専門家)への導入を目指したテキストである。20世紀において大きな科学的成果をもたらした原子論・分子論に立脚する物質科学をベースとして生命科学にアプローチするテキストを執筆できればと以前から漠然と考えてきたが、今回「物質・材料テキストシリーズ」の一環として上梓させていただく機会を得、その背景について一言述べさせていただきたい。

21世紀初頭にヒトゲノムの解読が完了し、また、構造生物学や細胞生物学、さらにはデータサイエンス分野の急速な進展もあって、科学者・一般市民を問わず、生命科学への関心は昨今ますます高まっている。生体分子構造を解き明かすための放射光施設や核磁気共鳴などによる生体イメージング、低温電子顕微鏡等の技術開発に大型の科学技術予算が投入され、また、iPS細胞やゲノム編集などの新規技術にも一般の耳目が集まっている。書名に用いた「計算分子生物学」とは耳慣れない言葉だが、今回本書を執筆するにあたり、あらためて、生命を「記述」するとはそもそも何か、という基本的な問いに直面せざるを得なくなった。そして、その(当面の)回答としてはおそらく、「科学として万人が納得する普遍的形式は未だ確立していない」ということになるのであろう。医療や創薬への応用、あるいは基礎生物学として、状況や目的に応じて適切な「実用的」手法を選択する、というのが現状での優等生的な答えであろうか。

「記述の形式」として本書を選んだのは、ボトムアップ的あるいは第一原理的な「物質科学」の形式である。これはある意味かなり過激な選択である。というのは、今まで「生命の理論」について思考してきた多くの研究者にとっては、「それはできない」という無謀な試みと言えるからである。生命には生命系特有の論理があり、それは、原子・分子から一歩ずつ積み上げていくような悠長なやり方ではいつまでたってもゴールに辿り着けないという「思想」は古くから生命系研究者の間に根強く存在してきた。だが、「非生命系」を扱う物

質・材料科学においては最もオーソドックスに思われるアプローチが、こと「生命系」に対しては最も挑戦的な試みになるという逆説的な展開に、筆者はむしろ科学の醍醐味のようなものを感じてしまう。この点については、本書の第1章ならびに第7章を参照されたい。

本書は、主に物理学や化学の分野で物質世界の記述法を学んできた人たちや、あるいは情報科学や計算科学を専門としてきた人たちが、生命科学、特に分子生物学分野の様々な実際的なトピックスに理論・シミュレーション的な手法でアプローチする上での手引き・マップを提供することを一つの意図としている。もちろん、もともと生命科学分野に属する研究者が物質科学的なアプローチを学ぶ手引きとして使っていただくことも歓迎する。そのため、量子化学や分子シミュレーション・粗視化シミュレーションの基礎的な知識やノウハウをある程度丹念に述べた後、いくつかの応用事例に展開するという構成になっている。限られた紙幅もあり、また、広範な領域を対象とする「マップ」的な性格上、できるだけ全体的・俯瞰的な面を重視し、そのぶん数式の詳細な導出等をスキップした点が多々あることをご容赦願いたい。ただし、大学学部レベルの分子生物学、生化学、統計熱力学、量子力学等の基礎知識があれば、他の類書やインターネット情報などを援用することで、数式の導出を自ら行うことも可能であり、少なくとも数式の意味が直観的に理解でき、数式のギャップによる読者のストレスを最小限にするよう、できるだけ配慮したつもりである。これらの意図が十分果たされたかどうかについては、読者諸氏の忌憚のないご批判を仰ぎたいと思う。

最後に、本書の執筆を薦めていただき、また原稿に対して的確なご意見・ご指摘をいただいた藤原毅夫東京大学名誉教授、ならびに、ともすれば遅れがちな執筆や校正作業を粘り強く見守り、励ましていただいた内田老鶴圃の内田学氏に心より感謝申し上げたい。さらに、本書で用いたいいくつかの図の原図をご提供いただいた何名かの共同研究者の皆様のご好意にも感謝したい。

2018年10月

田中 成典