

## ◇研究目的

民族薬物研究センター国際共同研究部では、バイオ・ケモインフォマティクスを利用して和漢医薬・民族薬物について研究を進めている。特に、コンピュータシミュレーションである量子化学計算や分子動力学計算を利用して、和漢薬有効成分の解析に応用し、その分子構造と生理活性との量子化学的な相関性を明らかにしようとするものである。ほかに、ゲノム研究などのバイオインフォマティクスの成果である様々な生体物質に関する情報を利用して、和漢薬有効成分の作用機序を明らかにする研究を実施している。さらに、これらの研究成果をデータベース化し情報発信も実施していく。

また、伝統薬物・薬用植物に関する国際的共同研究の推進を目的に、北京大学薬学院との共同研究拠点 (International Collaboration Center for Conservation and Efficient Utilization of Medicinal Resources) 事業を展開している。

## ◇研究概要

## I) バイオ・ケモインフォマティクスを利用した和漢薬成分の解析

- 1) 和漢薬成分の量子化学計算手法を用いた解析
- 2) 和漢薬成分の立体構造データベースの構築

## II) 和漢医薬学におけるゲノム解析の臨床応用

- 1) 和漢薬成分とヒトタンパク質の結合解析シミュレーション
- 2) コンピュータシミュレーションによる、和漢薬成分の体内動態解析

## ◇原著論文

- 1) Tanaka Y., Ichikwa T., Tada-Umezaki M., Ota Y., and Nakahara M.: Quantum Oracles in terms of Universal Gate Set. *International Journal of Quantum Information (IJQI)*, 6: 1363-1381, 2011.

**Abstract:** We present a systematic construction of quantum circuits implementing Grover's database search algorithm for arbitrary number of targets. We introduce a new operator which flips the sign of the targets and evaluate its circuit complexity. We find the condition under which the circuit complexity of the database search algorithm based on this operator is less than that of the conventional one.

## ◇学会報告

- 1) 伊藤泰地, 武田湧, 兼松佑典, 梅寄雅人, 北幸海, 立川仁典: Ginsenoside 類等の薬効機構の解明, 日本コンピュータ化学会 2012 秋季年会, 2011, 11, 4-5, 福井.

- 2) 梅寄雅人, 杉本佳奈子, 春木孝之, 伊藤泰地, 武田湧, 兼松佑典, 東田千尋, 北幸海, 立川 仁典: 量子化学的計算による人参薬効成分: Ginsenoside 類などの薬効機構の解明, 日本薬学会第 132 回年会, 2012, 3, 28-31, 札幌.

## ◇共同研究

### 国内

- 1) 立川仁典: 横浜市立大学 大学院国際総合科学研究科, 「和漢薬有効成分の量子化学的計算による解析」, 2011, 4~
- 2) 春木孝之: 富山大学工学部, 「和漢薬有効成分と標的タンパク質の分子動力的解析」, 2011, 9~
- 3) 小野慎: 富山大学工学部, 「コンピュータケミストリーによる分子設計支援」, 2011, 10~

## ◇非常勤講師

- 1) 梅寄雅人: 富山大学大学院理工学教育部物質生命システム工学専攻修士課程講義「生物有機化学特論」2011, 6, 27, 富山.

## ◇研究費取得状況

- 1) 平成 23 年度 富山大学和漢医薬学総合研究所公募型共同研究 一般研究 I (本学研究代表者: 梅寄雅人) 800 千円 「量子化学的計算手法による人参薬効成分: Ginsenoside 類などの薬効機構の解明」

## ◇活動事業実績

### 北京大学薬学院との共同研究拠点事業

和漢医薬学総合研究所は 2005 年に北京大学医学部と「薬用資源研究における国際協力拠点設置に関する協定」を結び, 双方の大学内にそれぞれ国際協力拠点 (International Cooperative Center Office: ICCO) を設け, 学術交流実績を積み上げてきた。その後, 本協定が満了となった 2010 年 3 月 26 日に, 「富山大学と北京大学医学部との薬用資源研究における ICCO 設置に関する協定」として再締結し, 北京大学医学部内に ICCO 富山大学を, また富山大学に ICCO 北京大学をそれぞれ整備し, 両大学が相互に有効活用することとした。2011 年度の活動を次にまとめる。

#### 1) 学術交流

- ・ 2011 年 2 月 23 日~2 月 26 日: 渡辺志朗准教授 (臨床利用分野) が北京大学医学部薬学院を訪問し, 「Differential roles of bile acid conjugates and phospholipids in the activation of pancreatic lipase by bear bile and cattle bile」と題して講演を行った。
- ・ 2011 年 3 月 23 日: 柴原直利教授 (漢方診断学分野) が北京大学医学部薬学院を訪問し, 「漢方薬の臨床効果とその構成生薬の品質との関係」と題して講演を行った。

#### 2) 共同研究

北京大学薬学院の蔡 少青教授と「Aristolactans の生薬類における分布と腎毒性」に関する共同研究を継続して実施した (生薬資源科学分野・小松かつ子教授)。

(文責: 小松 かつ子)