

2-17 自然科学研究機構連携事業

2-17-1 イメージング・サイエンス

(1) 経緯と現状

研究所の法人化に伴い5研究所を擁する自然科学研究機構が発足し、5研究所をまたぐ新研究領域創成の一つのプロジェクトとして「イメージング・サイエンス」が取り上げられることとなった。以下に、その経緯と現状について述べる。

平成16年度に機構が発足した後、研究連携室で議論がなされ、機構内連携の一つのテーマとして「イメージング・サイエンス」を立ち上げることが決定された。連携室員の中から数名の他に、各研究所からイメージングに関連する研究を行っている教授・助教授1～2名が招集され、「イメージング・サイエンス」小委員会として、公開シンポジウムその他プロジェクトの推進を担当することとなった。

平成17年8月の公開シンポジウム（後述）の後、小委員会において、本プロジェクトの具体的な推進について議論を行った。この機会に、各研究所が持つ独自のバックグラウンドを元に、それらを結集して、広い分野にわたる波及効果をもたらすような、新しいイメージング計測・解析法の萌芽を見いだすことが理想、という議論がなされた。それに向けた方策として、機構内の複数の研究所にまたがる、イメージングに関連する具体的な連携研究テーマをいくつか立てる案を連携室に提案したが、予算の問題等もあってこれは実現しなかった。

現状では、機構の特別教育研究経費「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」の新分野創成型連携プロジェクトの項目として、イメージングに関連した研究所をまたがる提案が数件採択されている（「イメージング・サイエンス——超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕相關3次元イメージング——」など）。これが上述の提案に代わるものとして、「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進している。

(2) 実施された行事

このプロジェクトの具体的な最初の行事として、各研究所のイメージングに関わる興味の対象と研究ポテンシャルを、5研究所が互いに知ることを目的として、「イメージング・サイエンス」に関する公開シンポジウムを開催することとなった。

平成17年8月8日・9日に、「連携研究プロジェクト Imaging Science 第1回シンポジウム」として、公開シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。このシンポジウムでは、天文学、核融合科学、基礎生物学、生理学、分子科学におけるイメージング関連研究に関する、機構内外の講師による16件の講演、及び今後の分野間連携研究に関する全体討論が行われた。参加者は機構外36名、機構内148名、大学院生80名、合計264名を数えた。また、講演と全体討論の内容は、175ページのプロシーディングス（日本語）としてまとめられ、同年12月に発行された。この機会によって機構内のイメージング・サイエンス関連研究に関する研究所間の相互理解が進み、その後の機構内連携研究の推進に相当に寄与したと考えられる。

平成18年3月21日には、立花隆氏のコーディネート、自然科学研究機構主催で「自然科学の挑戦シンポジウム」が東京・大手町で開催された。これは、一般の観客を対象に、機構の研究アクティビティーをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる一般参加者があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集

まりパネルディスカッションが開かれた。

平成 18 年 12 月 5 日 - 8 日には、第 16 回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが “ Advanced Imaging and Plasma Diagnostics ” とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。

2-17-2 自然科学研究機構 新分野創成型連携プロジェクト 自然科学における階層と全体

自然科学研究機構の新分野創成型連携プロジェクトとして実施されている「自然科学における階層と全体」は、分子科学研究所、生理学研究所、基礎生物学研究所により実施されている「プロジェクト 1：生物系における情報統合と階層連結」と核融合科学研究所、国立天文台を中心として実施されている「プロジェクト 2：重力多体系・プラズマ系における連結階層シミュレーション研究拠点形成——長距離相互作用が支配する多体複雑系での連結階層シミュレーション研究拠点形成——」の二つのプロジェクトを中心にしている。全体会議、シンポジウム等は、2つのテーマを合同で扱い、自然科学に於ける階層と全体という新しい視点で自然科学の理解を深め、新分野創成に繋げて行くことを目指している。

分子科学研究所が主に関与しているプロジェクト 1 の概要は、以下の通りである。生物系における研究においては、遺伝子や蛋白質に関する分子レベルでの膨大な情報が得られている一方で、これら分子レベルの情報から、生理機能の発現や形態形成などの「生物らしい」振る舞いが生じるプロセスについては、未解明な点が多く残されている。これは、生体が、分子、細胞、器官、個体といった異なる階層により構成されていることにも起因している。生体機能の成り立ちを知るためには、各階層において「階層を構成する素子（エレメント）についての理解」から始まり、「階層内でのエレメントの複合体化と情報のやりとりによる機能創出機構」の解明、さらには「上位階層への連結機構」を明らかにすることが必要である。分子・細胞の階層を例にあげると、各分子の機能を明らかにするだけではなく、分子複合体形成による新規機能の創出、分子間の情報伝達による機能統合を知ることにより、はじめて、細胞機能の成り立ちの仕組みが理解できると考えられる。すなわち、遺伝子や蛋白質など分子レベルの情報が、細胞機能のようなマクロなレベルへ伝達される過程を理解すること、分子が担う情報がよりマクロな階層で統合され、細胞や組織さらには個体の振る舞いが創発される過程を理解することが、我々が取り組むべき課題であるとも言える。

本プロジェクトにおいては、異なる研究バックグラウンドを有する研究者が、上記のような意識を共有した上で、有機的な連携を計りつつ、「生物系における情報統合と階層連結」に関する包括的理解に向けて、具体的には以下に述べるような研究を行う。分子科学研究所からは、小澤岳昌助教授がテーマ(1)、青野重利教授がテーマ(2)に関する研究を進める。

テーマ(1): 生体内における情報統合および機能統合を解析するための新規な研究ツールの開発を目的として研究を行う。本研究では、タンパク質再構成系 (protein reconstitution system) という新たな概念に基づくレポータータンパク質を創案・開発し、生きた動植物個体内で機能する生体分子を可視化するための、新たな原理に基づくプローブ分子を開発する。具体的には、RNA、タンパク質間相互作用、タンパク質リン酸化、酵素活性、セカンドメッセンジャー、ステロイドホルモン等を標的とし、蛍光あるいは発光に情報変換するプローブ分子を開発する。また、他の研究グループの研究に対し、このようにして開発したプローブ分子の積極的な適用を計る。

テーマ(2): 分子間情報伝達による情報統合および機能統合の分子機構解明を目的として研究を行う。本研究では、外部情報による遺伝子発現ネットワークの制御に関与するセンサー型転写調節因子、外部情報(外部環境シグナル)による細胞運動制御系である走化性制御系を対象として研究を行う。特に、センサー型転写調節因子による外部情報センシング機構および遺伝子発現調節機構の解明、走化性制御系における情報統合機構の解明、ならびに統合された情報が如何にして細胞の運動制御というマクロな性質に反映されるのか、その分子機構の解明を中心に研究を進める。

テーマ(3): 分子階層における情報の統合により細胞階層での機能を理解することを目的として研究を行う。本研究では、イオンチャネル・受容体等の神経細胞の機能素子の、分子間相互作用や分子複合体形成による機能修飾に関する研究を行う。具体的には、代謝型グルタミン酸受容体の分子複合体形成によるG蛋白質応答の種類の切り換え、ATP受容体チャネルの発現状況依存的な構造と機能の変化、細胞長伸縮に寄与する陰イオントランスポーターファミリーに属するプレスチンの分子複合体の同定とその機能的意義の解析に焦点をあてて研究を進める。

テーマ(4): 生体情報の統合による個体階層での行動の規定について理解することを目的として研究を行う。本研究では、空腹等の生体情報や、脂肪細胞由来の液性調節因子レプチン等による情報が視床下部で統合されて、摂食行動やエネルギー消費行動に結びつく機構を明らかにする。なかでも、視床下部における生体情報の統合に重要な役割を果たしている酵素AMPキナーゼの働きに着目して、この遺伝子を改変した実験動物等を用いて行動レベルでの研究を進める。

テーマ(5): 情報が統合され機能が創出される過程を、数理的手法を用いて研究する。本研究では、シグナル分子の個別的な相互作用から、分子の時空間分布の非一様性が作り出され、生体機能が生まれる過程を、ダイナミクスとして捉え、微分方程式系などを用いて解析する。具体的には連携内の他のグループの実験データを対象とした共同研究を目指す。生体機能創出に必要な、分子間相互作用の条件を、力学系理論を元に定める。これにより、分子階層における情報を統合し、機能階層の視点から意義付けを行うと同時に、それぞれの階層における振る舞いを予測する。

テーマ(6): 分子キラリティのような分子レベルでの情報が、細胞や個体といった上位階層の情報に展開されていく過程の解明を目的として研究を行う。本研究では、発生における生物の左右性決定において、マウス初期胚の繊毛が作る左向き水流(ノード流)の役割を解明する。ケモルミネッセンスや二光子顕微鏡といったイメージング技術を用い、*in vivo*でノード流がどのような水流のパターンを作るか調べる。また水流が体の右側と左側の細胞に何らかの差を生み出す機構として、シグナル分子の不均一な拡散、あるいは分子ではなく物理的な刺激が働いている可能性を想定し、シミュレーションによる検討を行うと共に、カルシウム濃度や膜電位の測定、分子プローブによってその実体を探索する。

今年度は、7月19日、20日の二日間、箱根において「自然科学における階層と全体」第3回シンポジウムを開催した。本シンポジウムには、外部からの講演者とプロジェクト1ならびにプロジェクト2に参加している研究者からの講演の他、全体討論を行い今後のプロジェクトの進め方についても議論した。12月25日には、岡崎において「プロジェクト1: 生物系における情報統合と階層連結」に参加しているメンバーによる今年度の成果報告会を行い、成果の総括と今後の方針が話し合われた。

2-17-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成 巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成

方法論の開発からそれに基づいた巨大計算にいたるまで、分子・物質の第一原理から出発した計算科学研究の中核拠点を形成し、物質科学および分子・物質を核とするナノサイエンス、バイオサイエンス等の自然科学の諸分野における世界の主導権を獲得することを目的として、分野間連携に基づいて、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学といった異なる自然科学階層に属する各分野での異なる物質観、異なる方法論をお互いに共有しまた融合することにより、特に大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現するとともに、それぞれの分野においても方法論に新機軸をもたらし、学際的新分野を形成することを目指している。

更に、機構内外におけるこのような活動を通して、分子・物質シミュレーションナショナルセンター形成へ向けての基盤形成を行っている。

このため、2006年度は、連携研究、ワークショップ、人材育成等について以下に示すような活動を行った。

(1) 連携研究

連携推進課題（3課題）（*責任者）

- ・巨大計算に向けた粒子シミュレーション手法の開発（分子研・岡崎*、平田、永瀬、斉藤、核融合研・堀内、天文台・富阪、東大・北尾、産総研・森下）
- ・分子多量体形成と生理機能（基生研・望月*、生理研・永山、分子研・斉藤、岡崎、東大・北尾）
- ・物質・電磁場相互作用系のシミュレーション（分子研・信定*、米満、森田、核融合研・中島）

連携課題（13課題）

- ・プラズマ大規模シミュレーションのための効率的並列計算手法開発（核融合研・堀内、中島）
- ・輻射輸送計算を用いた星間化学進化の研究（天文台・富阪）
- ・ミトコンドリアの energetics simulation（生理研・永山）
- ・概日リズム振動の生体分子反応シミュレーション（基生研・望月）
- ・両親媒性分子水溶液の大規模分子動力学計算（岡崎）
- ・量子古典結合多粒子系の非平衡集団運動制御の理論（米満）
- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（森田）
- ・ナノ分子の量子化学計算（永瀬）
- ・電磁場と露わに相互作用した多電子ダイナミックスの解析（信定）
- ・3次元 RISM による分子認識（平田）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミックス（斉藤）
- ・第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズム（産総研・森下）
- ・生体超分子の立体構造変化と機能（東大・北尾）

(2) ライブラリの整備

(3) ワークショップ

- | | |
|------------------------|-------------|
| ・第3回連携シンポジウム | 3月15日 |
| ・第2回国際シンポジウム | 5月17日 - 19日 |
| ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー | 第11回～第20回 |
| ・討論会、学会の共催 | |

(4) 人材育成

第2回集中セミナー

「QM/MM法の基礎と応用 - 大規模分子計算へのアプローチ」12月25日 - 27日

(5) 実施体制

機構内12グループ 計算分子科学、理論分子科学、天文台、核融合研、生理研、基生研

機構外2グループ 東大、産総研

2-17-4 自然科学研究機構シンポジウム

「爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——」

分子科学研究所が中心となって、平成18年9月24日(日)に東京国際フォーラム(東京都千代田区)にて自然科学研究機構シンポジウムを開催した。前回の平成18年3月22日第1回に続き、2度目の開催であった。当日は、台風が心配されたが秋晴れとなり、関係者を除き525人の参加者で会場が埋め尽くされた。

今回のシンポジウムでは「光科学」をキーワードに、分子科学研究所が中心となり、光科学に関する最先端の研究を紹介した。講演会は「新しい光源」、「光と分子」、「光と生命体」の3部構成で行われた。まず、志村機構長の開会の辞に続いて、立花隆氏が聞きどころを紹介された。つづいて、松本吉泰教授がイントロダクションとして「新しい光源、光と分子」の概説と光の性質についての基礎的な話をした。その後、分子研が頻繁に利用する2種類の光源の紹介として、平等拓範助教授が手のひらサイズの高輝度レーザーの最先端について、加藤政博教授からシンクロトロン放射の原理や分子研放射光施設 UVSOR-II の紹介および今後の展望について講演した。平等助教授が光源の小型化と単色性の重要性を強調し、加藤教授が大型加速器を用いた白色性を重視したのは対照的であった。

午後は、大森賢治教授が、量子力学の不思議として光の二重性(粒子性と波動性)、自身のアト秒精度での原子波の干渉実験、分子を使った量子メモリーなどに関して紹介した。次に化学の話に移り、江東林助教授は、デンドリマー分子を利用し、枝の部分で吸収した光エネルギーを分子中心に集めることが出来る分子設計、水の光還元、さらに医療への応用やその将来性について講演した。続いて、藤嶋昭先生(神奈川科学技術アカデミー理事長)はご自身の本多・藤嶋効果の発見から現在に至る一貫したTiO₂光触媒の基礎的、応用的研究に関して熱弁下さった。

続いて、光と生命体へと話が移り、三室守先生(京都大学)の概説に引き続き、基礎生物学研究所の和田正三先生が葉緑体の光感知と細胞内移動について、総合研究大学院大学・基礎生物学研究所の渡辺正勝先生がミトコンドリアの光センサーについて、生理学研究所の鍋倉淳一先生が二光子顕微鏡による脳の神経ネットワーク観察について講演された。

すべての講演の後には立花隆氏が質問やコメントをする時間を設けた。同氏の時には刺激的な質問やコメントは聴衆が違った角度から講演内容を捉えるのに役立ったと考えられる。また、最後の総括では、立花隆氏が、光科学は幅広く生活に関係し、今後日本の技術発展にどれほど必要で重要であるかを述べられた。閉会の辞として、分子研の中村宏樹所長が今後の光科学の展望と多くの方の静聴に対する謝辞を述べ、会は終了した。

前回に引き続き今回もほとんど途中で席を立つ参加者もなく、朝10時から夕方5時30分まで終始大盛況であった。話題が豊富すぎ、プログラムがタイトすぎだったかもしれない、お昼の休憩や講演の合間に展示の説明をする時間がほとんどとれなかった。それでもわずかな時間に多くの方が展示にも足を運んでくださった。参加された方の長時間にわたる熱心なご静聴と自然科学への熱い想いに感謝したい。

プログラム

10:00 ~ 10:05	機構長挨拶 志村令郎（自然科学研究機構）
10:05 ~ 10:10	趣旨説明 プログラムコーディネーター 立花 隆
【新しい光源】	
10:10 ~ 10:25	Overview 松本吉泰（分子科学研究所）
10:25 ~ 11:05	光シンセサイザーを手のひらに——マイクロ固体フォトニクスの新展開—— 平等拓範（分子科学研究所）
11:05 ~ 11:45	宇宙の光を地上でつくる——シンクロトロン光源—— 加藤政博（分子科学研究所）
11:45 ~ 12:50	休憩
【光と分子】	
12:50 ~ 13:30	量子のさざ波を光で制御する 大森賢治（分子科学研究所）
13:30 ~ 14:10	光を吸う分子の木 江 東林（分子科学研究所）
14:10 ~ 14:50	光触媒がもたらす安全・安心な社会 藤嶋 昭（神奈川科学技術アカデミー）
14:50 ~ 15:05	休憩
【光と生命体】	
15:05 ~ 15:20	Overview 三室 守（京都大学）
15:20 ~ 16:00	葉緑体の光による細胞内移動 和田正三（基礎生物学研究所）
16:00 ~ 16:40	光を見る微生物のしくみ 渡邊正勝（総合研究大学院大学・基礎生物学研究所）
16:40 ~ 17:20	発達する脳を光で見よう 鍋倉淳一（生理学研究所）
17:20 ~ 17:25	総括 プログラムコーディネーター 立花 隆
17:25 ~ 17:30	閉会挨拶 中村宏樹（分子科学研究所長）

各講演内容の詳細は立花ゼミ公式サイト「サイ」<http://www.kuba.co.jp/nins/index.html> に紹介されている。