

機構共通研究施設（分子科学研究所関連）

統合バイオサイエンスセンター

本組織は、分子科学、基礎生物科学、生理科学の学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な問題意識と方法論を適用、駆使することによって、新しいバイオサイエンスを切り開く事を目的として設立された機構共通の研究センターで、生物諸科学、医科学のみならず、化学、物理学をも内包する研究課題をとり上げていく事が期待されている。岡崎の3研究所と連帯を密にしながら、人事交流も含めた研究展開をはかり、研究課題は5年毎に見直すことになっている。

本センターの研究は、生命現象の基本に関する諸問題を分レベルから細胞、組織レベルまで統合的に捉える基礎研究を中心にする。具体的には、発生、分化、再生等の時系列的に沿った生命現象、情報の発生、伝達、応答など生体分子の構造と機能の解明を図る戦略的方法論、生体を取り巻く環境因子とその応答など生命環境に関する諸問題、を各々中心課題とする3つの研究領域を置く。一研究領域は3人の専任教授と2～3人の助教授から成り、生命環境研究領域のみ客員教授と助教授が1人ずつついている。

センター長は平成15年4月から北川禎三教授が務めている。分子科学研究所からは、戦略的方法論研究領域に木下一彦教授、青野重利教授、藤井浩助教授、生命環境研究領域に北川禎三教授、そして客員研究部門に名古屋大学大学院理学研究科の倭剛久助教授が加わっている。

戦略的方法論研究領域

1. [分子生理グループ]

たんぱく質（あるいはRNA）の分子はたった1個で見事な機能を発揮するので、分子機械と呼ばれる。我々の目標は、生体分子機械の働く仕組みを探ることである。このために、光学顕微鏡の下で、分子機械1個1個が働く様子を直接観察し、さらに光ピンセットや磁気ピンセットといった道具を使って分子をつまんだり引っ張ったりする。すでに、回転モーター分子やリニアモーター分子など、分子モーターと呼ばれる分子機械の仕組みが分りはじめてきている。



（後列左から）榎直由、足立健吾、牧泰史、尾上靖宏
（中列左から）古池晶、城口克之、木下一彦
（前列左から）余語克紀、昆理恵子、神田律子、深津美紀子

2. 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能の解明 [生物無機グループ]

近年、酸素，一酸化炭素等の気体分子が，生体系においてシグナル分子として機能することが分かり，注目を集めている。当研究グループでは，これらの気体分子が，生理的なシグナル分子として機能する場合に必要な不可欠なレセプター（センサー）タンパク質を対象に，研究を進めている。分子生物学的，および物理化学的な実験手法を駆使することにより，酸素センサータンパク質（HemAT），および一酸化炭素センサータンパク質（CooA）による酸素，一酸化炭素センシング機構，シグナル伝達機構を明らかにし，それらの構造機能相関の解明を行なう。



（後列左から）吉村英哲、稲垣さや香、小林克彰
（前列左から）中島洋、青野重利、谷澤三佐子

3. [生体物理グループ]

金属酵素がもつ構造の規則性と機能の関わりを，活性中心モデル錯体の電子構造やタンパク質の作る反応場の特色から研究している。さらにその成果を基に，既知の金属酵素の機能改質や人工酵素，機能性触媒などの新規物質の開発を進めている。



（左から） 藤井 浩、 岡目理人、 倉橋拓也

生命環境研究領域

1. [生体分子グループ]

生体分子の構造と機能の相関を主に振動分光学の手法を用いて研究している。ピコ秒の時間分解能で蛋白質の動的構造を論じる研究や、酵素反応中間体の検出による反応メカニズムの議論まで生体分子科学を広くカバーしている。



(後列左から)長野恭朋、奥野大地
(中列左から)内田 毅、WALKER, Gilbert、太田雄大、PAL, Biswajit
(前列左から)平松弘嗣、長友重紀、磯貝美穂、佐藤 亮、北川禎三

計算科学研究センター

本センターは我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとしての経験を活かし、これまでの分子科学計算に加えて分子科学-生物科学の境界領域に展開を図る目的で昨年度発足した機構共通施設である。

本センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは国内における分子科学者の共同利用施設として1977年に設立され、一方では国際的にもピークをなす計算を行い、他方では国内の計算化学全体の底上げを行うという二重の役割を果たしてきた。

まだ、ワークステーションが普及していなかった時期に地方の大学などで計算機にアクセスできなかった研究者に計算資源を提供し、その中から国際的にも高い評価を受けている分子科学のリーダーを数多く輩出してきた。現在、世界で発表されている量子化学関連論文全体の2, 3パーセントが旧「分子研電算センター」を使って行われたものである。旧分子研電算センターは分子研「電子計算機室」に改組され、そのスタッフは計算科学研究センターも兼務し、その中核としてセンターのハードウェア・ソフトウェアの維持・管理、共同利用者へのサービス業務、マシンの更新・導入などの業務に携わっている。

現在、センターにおいて稼動している主なコンピュータは(1) Fujitsu VPP5000 (30 PE; 総理論演算性能, 288 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB), (2) SGI Origin2800 (192 CPU; 総理論演算性能, 115 GFLOPS; 総主記憶容量, 192 GB), Origin3800 (128 CPU; 最高演算性能, 102 GFLOPS; 総主記憶容量, 128 GB), (3) NEC SX-7 (32 CPU; 総理論演算性能, 282 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB) および (4) NEC TX-7 (64 CPU; 総理論演算性能, 256 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB) であり、全国のユーザーのサービスに提供されている。また、機構内の生物関連分野の高速シミュレーション計算を主な対象としたHITACH SR8000F1も稼動している。

現在、センターは共同利用施設として分子科学分野を中心に機構内外の約150グループ以上、700名弱のユーザーにサービスを提供しており、文字どおり我が国における理論分子科学分野の計算センターであるが、最近、その環境に変化が生まれつつある。以前、センターの重要な機能のひとつはコンピュータにアクセスできない多くの研究者に計算機資源を提供することであった。しかしながら、ワークステーションの急速な普及によって、通常の計算は自前のワークステーションで行うことができるようになり、大型計算センターとしての位置づけは、むしろ、ワークステーションでは処理が困難であるような大規模計算を可能とする点に比重が移りつつある。このような計算機環境の変化を考慮して、計算科学研究センターでは通常の利用申請の他に全CPU時間の半分程度を上限として「特別利用申請」枠を設け、特別プロジェクトの募集を行っている。

計算科学研究センターを巡るもうひとつの重要な変化は生物関連の計算・情報処理に関する要求の増大である。センターでは、当面、分子科学-生物科学の境界領域における分野への展開を図り、同時に、より広い生物分野に守備範囲を拡大するための条件づくりをハード、ソフト、およびスタッフの面で進めようとしている。



(後列左から)明石志保子、岡本慶之、三上泰治、小松孝弘、田中純志
(前列左から)佐藤昌宏、松田成信、岡崎 進、三浦伸一、岩橋建輔