

岡崎共通研究施設（分子科学研究所関連）

岡崎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岡崎三研究所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研究所と連携を密にしながら、自然科学のグローバルな観点から研究展開をはかり、基礎科学のフロンティアを形成する事が期待されている。

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、組織レベルまで総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17年3月まで北川禎三教授が務めたが、4月から高田慎治教授に交代した。分子科学研究所からは、戦略的方法論研究領域に青野重利教授、木下一彦教授の後任教授、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阪大蛋白質の高木淳一教授が加わっている。

戦略的方法論研究領域

1. 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



（後左から）青野重利、吉岡資郎、小澤一道、小林克彰
（前左から）谷澤三佐子、稲垣さや香、西村宗十、吉村英哲

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っている。さらに、新規なセンサータンパク質であるDcrA、Htr8などについても、その構造機能相関の解明を目指して研究を進めている。

2 . [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、倉橋拓也、鬮目理人、望月俊介

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) GU, Yuzong、EL-MASHTOLY, Samir、平松弘嗣、久保 稔、VAROTSIS, Constantinos、内田 毅、當舎武彦、長野恭朋、呂 明
(前列左から) 北川禎三、MAHINAY, Myrna、磯貝美穂、水木寛子、高影、李 江

計算科学研究センター

本センターは、前身である分子科学研究所電子計算機センターの設立以来4半世紀以上にわたり、分子科学に関わる計算科学研究センターとして分子科学および分子科学と生物科学の境界領域に対して計算科学研究の展開を図っており、文字どおり、我が国における理論分子科学分野の拠点計算機センターとして機能している。

このような歴史を踏まえつつ、現在では共同利用施設として進むべき二つの柱を据え、日々業務に励んでいる。第一番目のものは、分子科学を中心として全国に広がる研究者に対して行っている高性能ハードウェア、ライブラリ等の計算環境の提供である。平成16年4月現在、既に研究所内外の約110グループ、450名のユーザーにサービスを提供しており、この目的で、現在スーパーコンピュータシステムおよび汎用高速演算システムを運用している。

これらシステムにおける主なコンピュータは、(1) Fujitsu VPP5000 (30 PE; 288 GFLOPS; 256 GBメモリ)、(2) SGI SGI2800 (192 CPU; 115 GFLOPS; 192 GBメモリ)、Origin3800 (128 CPU; 102 GFLOPS; 128 GBメモリ)、(3) NEC SX-7 (32 CPU; 282 GFLOPS; 256 GBメモリ)、(4) NEC TX-7 (64 CPU; 332 GFLOPS; 256 GBメモリ)である。さらに、機構内利用者向けの高速シミュレーションシステムとしてHitachi SR8000F1 (6ノード; 72 GFLOPS; 96 GBメモリ)も稼働している。

第二番目は、単なる計算環境の提供にとどまるのではなく、物質に関わる計算科学分野における学術的発展そのものに中心的役割を果たしていくことである。このため、すでに平成15年度に発足した我が国のナショナルプロジェクトである文部科学省「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」においては、理論分子科学研究系、計算分子科学研究系とともに、グリッドコンピューティングに基づいた「ナノサイエンス実証研究」を担当し、他大学、共同利用機関等と共同して研究グループを全国的に組織し、その中核研究センターとして活動してきている。

このプロジェクトで用いるグリッドコンピューティングシステムとして、(1) Hitachi SR11000 50ノード (800 way; 5.4 TFLOPS; 3 TBメモリ)、(2) Hitachi HA8000/110H9 449ノード (898 CPU; 5.4 TFLOPS; 1.7 TBメモリ)を運用している。



(後列左から) 澤昌孝、大野人侍、内藤茂樹、水谷文保、矢崎稔子、岩橋建輔、三上泰治、村越稔、石田干城
(中列左から) 禿子瞳、戸谷明子、川口律子、加納聖子、中岡由美子、池田由佳子、岡沙佑美、山田篤志、吉井範行、石山達也、李洪珍
(前列左から) 森田明弘、三浦伸一、永瀬茂、岡崎進、松田成信、手島史綱