



「特異点」

石井 志保子 (数理科学研究科 教授)

曲線や曲面上には滑らかな点もあれば、尖った点や交叉した点もある。たとえば曲線上の点で接線がただひとつしかないような点を滑らかな点（非特異点）とよび、接線がいくつもあるような点を特異点とよぶ。こうして厳然として存在する特異点は永らく数学のお荷物であった。この特異点のため色々不都合なことが起こるのだ。

この不都合を解消するために、特異点解消理論が登場した。広中平祐氏による業績（1960年代）で、特異点のある操作で滑らかなものに変換する理論である。特異点は、接線が一点にたくさん集中しているようなものだから接線をバラバラにするような操作（ブローアップ）をすればどの点も滑らかになるだろうという発想が成功を取めた。たとえば8の字型の曲線の交叉した点は特異点であるがこの点をブローアップすると、交叉

した点は3次元空間の中で立体交差する滑らかな曲線になる。これにより特異点をもつ対象を調べるのに、特異点解消をした滑らかな対象を調べるという考え方で、特異点理論は発展してきた。

いっぽうで特異点には付随する弧空間という空間がある。特異点を通る弧（微小な曲線）をすべて集めた空間のことである。この弧空間が有限個のかたまりに分かれるのであるが、このかたまりと特異点解消に出てくる本質的な因子（特異点を爆発させたかけら）が1:1に対応するだろうという予想をジョン F. ナッシュ (John F. Nash) が提起した。弧空間という特異点そのものに付随するものと、特異点解消という人為的なものが対応するだろうという予想は驚異的なものである。この予想は36年後の2003年に石井-J. コラー (J. Kollar) によって、トーリック特異点の場合は肯定的に、

一般の場合は4次元以上で否定的に解かれた。その後、2次元ではJ. F. ボバディラ (J. F. Bobadilla) により肯定的に、つい最近、3次元ではT. ドウフェルネ (T. De Fernex) により否定的に解かれ、一応の着着はついた。ではナッシュの予想が一般には正しくないとすれば弧空間のかたまりと対応する本質的な因子はどんなものであろうか、というのが次なる疑問である。そのような中でJ. コラー氏はナッシュ予想のあるべき姿を主張するコラー予想を提起した。弧空間のかたまりと対応している因子は本質的な因子よりも強い条件をもつ、「ベリーエッセンシャル」な因子であろうというものだ。今ナッシュ問題の研究者はこの予想を新たな目標としているところである。



「クラウドソーシング」坂本 大介 (情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 助教)

クラウドソーシング (Crowdsourcing) とは不特定多数の人々 (Crowd) に作業を依頼する (Sourcing) 業務委託や問題解決の新しい手段である。理学のキーワード第29回の平木敬教授による「クラウドコンピューティング」(Cloud Computing) と同様にインターネットを手段として利用するが、クラウドソーシングでは作業を委託・委譲先の他者が行うことになる。

よく知られた業務委託形態であるアウトソーシングでは、業務や作業を専門家に依頼する。一方、クラウドソーシングでは作業を不特定多数の群衆に依頼する。一般に、クラウドソーシングのためのウェブサービスを經由して群衆の中で受託者を募る。通常、作業を行った受託者は委託者から報酬が得られるが、その

報酬はアウトソーシングの場合より安価であることが多い。

このクラウドソーシングが、なぜ理学の道具として有用なのか。昨年、オンラインゲーム「Foldit」のプレイヤー達がタンパク質の正確なモデル作成を行った研究^{注)}が、ネイチャー誌に掲載されて大きな話題となった。ゲームのプレイヤーの多くは生物化学の専門家ではないにもかかわらず、長年未解決であった問題が短時間で解かれたため、問題解決の新しい手段としてのクラウドソーシングが大きく注目される一つのきっかけとなった。

このようにクラウドソーシングが扱う対象は、一般的な業務だけではなく、科学的問題の解決や、日常の諸問題の解決まで多岐に渡る。たとえば、ビデオシー

ンや画像の認識、ウェブの検索、そして講義の課題をクラウドソーシングするようなシステムも提案されてきている。

群衆に作業を依頼するためには、適切な形で作業を群衆に提示する必要がある。これはユーザインタフェースの問題であり、ヒューマンコンピュータインタラクション (HCI) と呼ばれる研究分野において急速に注目を集め、数多くの研究が行われている。将来的には「Foldit」の例のように群衆が計算資源の一部となり、我々の研究活動を自然と助けてくれるようになることを期待している。

注) F. Khatib et al., *Nat. Struct. Mol. Biol.* **18**, 1175 (2011).



「相関エレクトロニクス」

高木 英典 (物理学専攻 教授)

固体中の絡み合う電子、すなわち相関電子の物理は、物性物理における研究の大きな潮流を形成している。これに基づき発現する革新的なデバイス機能が、「相関エレクトロニクス」である。

相関電子が活躍する典型的な舞台は、遷移金属酸化物である。そこでの電気伝導や磁性の担い手は、空間的な拡がりの小さいd軌道を占める電子である。二つの電子が同じ軌道に入ると強いクーロン斥力が働くので、それを避けるように互いに絡み合いながら動かざるを得ない。その結果、相互作用する原子や分子が物質の三態を形成するように、相関電子は固体中で、電子固体・液体・液晶とよばれる多彩な相を形成する。銅酸化物の高温超伝導現象(理学のキーワード2008年9月号)もその一例で、電子固体の融解や電子液晶相の形成が、超伝導発現の本質であるとされている。相関電

子の示す新奇な相を開拓し、相形成のメカニズムを探ることが、基礎科学として相関電子を研究する大きな目標である。

多彩な電子相は、互いに微妙なバランスで競合している。そこでは電荷、スピン、軌道と多くの自由度があるため、しばしばエントロピーが高い状態であり、突くと固まったり溶けたりするのと同様、電場や磁場に対して、劇的な相変化を示す。ここが相関電子という現象と、エレクトロニクスという実用を結ぶポイントである。たとえば電場で電子固体(絶縁体)と液体(金属)の間をスイッチする抵抗メモリ(ReRAM:酸化還元反応との協奏で不揮発メモリとして動作)、磁場で電子結晶を融解させる磁気センサーなどのデバイスが提唱され、一部は実用化に向けた研究も進んでいる。新タイプの熱電変換材料や、電子氷とよばれる蓄熱材料など、相関電子の高いエントロ

ピーを用いた熱機能にも注目が集まっている。

半導体デバイスの微細化が進み、ナノの世界に入ってくると、デバイス当たりの電子数が極端に小さくなり、原理的な困難に直面する。これに対して相関エレクトロニクス材料のベースは金属であり、電子の数が十分に大きい。このため、ナノデバイスの抱える原理的な困難を解決する新しいアプローチになっている。理学系研究科では現在、多彩な相関電子相の研究を、理論では物理学専攻の青木研究室や小形研究室、実験では物理学専攻の藤森研究室や高木研究室、化学専攻の長谷川研究室などが進めている。基礎的な興味が研究の中心ではあるが、強相関エレクトロニクスへの(意外な)展開が意識されている。



「火山ガス」

森 俊哉 (地殻化学実験施設 准教授)

火山ガスは、マグマの中に溶解していた揮発性成分が、マグマから脱ガスし、火山の火口や噴気孔から放出される気体成分のことを指す。その温度は、水の沸点以下の低温のものから1000℃をこえる高温なものまでである。低温な火山ガスは、その上昇過程で熱水系や地下水系などとの相互作用により、マグマ起源のガスだけでなく、熱水系や地下水系の成分を混在して含んでいる。一般に高温なガスほど、その影響は少ない。

火山ガスは、水蒸気、二酸化炭素、二酸化硫黄、硫化水素、塩化水素、フッ化水素、水素など多種の成分を含んでいるが、そのほとんどを水蒸気が占め、島弧火山の場合90%以上を占めることが多い。高温の火山ガス成分に含まれる、二酸化硫黄、塩化水素などの酸性ガスは有

毒であり人体への影響が大きいほか、周辺の環境や植生にも多大な影響をもたらす。2000年9月から2005年2月までの約4年半もの長期にわたり、三宅島島民が全島避難を余儀なくされたのは、噴火以降続いた大量の火山ガス(とくに二酸化硫黄)放出によるところが大きい。また、噴火噴煙が成層圏へ到達するような場合、火山ガスが引き起こす地球環境への影響も無視することはできない。

火山からの噴出物は、火山の地下の状態や地下で起こっている現象を地上へと伝えてくれ、火山現象を理解するうえでの欠かすことのできない情報源である。その中で火山ガスは、噴火していない時でも唯一手に入れることができるマグマ物質であり、この意味で、火山ガスの情報は貴重である。火山ガスの化学組成

は、揮発成分の源であるマグマの種類や酸化状態を反映することはもちろんのこと、マグマからの脱ガス時の温度・圧力を反映して変化するので、その挙動のモニタリングは火山活動の推移をみるうえで重要である。近年の観測技術の高度化と観測機器の小型化により、噴火に先行する火山ガス組成変化やガス放出量変化がとらえられるようになり、火山活動の予測の面での貢献が期待されている。

本研究科附属地殻化学実験施設では、火山ガス組成・放出率の遠隔測定や火山ガス中の希ガス同位体比測定を機軸とし、火山ガス放出過程の理解を目指した研究を進めている。



「人工 DNA」

竹澤 悠典 (化学専攻 助教)

“DNA にヒ素を含む細菌が発見された”というニュースが世間を賑わせたのは記憶に新しい。その後、続々と反論も寄せられた。このヒ素 DNA 騒動はさておき、“私たちのもつ DNA と異なるタイプの DNA は存在するか”という疑問は、分野を問わず興味のそそられる話題である。ヒ素 DNA の話題は生物内から未知の DNA を探す試みによるが、天然 DNA に類似した「人工 DNA」分子を化学的に合成してその機能を調べる研究は非常にさかんである。

遺伝情報の担い手である DNA は、4 種類の核酸塩基 (A, T, G および C) で構成され、それらが水素結合を介して 2 種類の塩基対 (A-T および G-C) を形成することで、二重らせん構造をとって

いる。人工 DNA の研究の中でも、この 2 種類の天然塩基対に加えて「第三の塩基対」を作り出す研究は、遺伝情報を飛躍的に拡張できる可能性からも多くの研究者の関心を集めてきた。1989 年にベンナー (Steven A. Benner) らが報告したイソグアニン-イソシトシン塩基対を筆頭に、(1) 水素結合の配置を変えた塩基対や、(2) 水素結合を持たずに疎水性効果を利用した塩基対、(3) 分子形状の相補性によりペアをつくる塩基対などが合成されてきた。相補的な塩基配列の認識や DNA 二重鎖の安定化、そして酵素による複製反応など、DNA 塩基対としての機能が詳細に調べられている。さらに最近では、バイオテクノロジーへの応用や DNA を用いたバイオ材料の

開発へと、人工 DNA 研究は幅広い展開を見せている。

本研究科でも、生物化学専攻の横山茂之教授 (当時) らが、酵素による DNA 複製反応 (PCR) や RNA への転写反応において高効率で機能する人工塩基対を開発した。また、化学専攻の塩谷光彦教授の研究室では、金属錯体を用いた機能性分子の創製を目指し、水素結合の代わりに金属配位結合で塩基対を形成する金属錯体型人工 DNA を合成している。DNA らせん内部への金属イオンの配列化や、磁性や導電性といった物性の制御など、超分子化学や材料化学を視野に入れた人工 DNA の探求をおこなっている。



「Tajima's D」

田嶋 文生 (生物科学専攻 教授)

DNA レベルの種内変異 (DNA 多型) の量は、ふつう π または θ という統計量をもちいて推定される。 π は塩基多様度といわれ、DNA 配列間の平均塩基相違数に基づいている。いっぽう、 θ は DNA 配列中の多型的な塩基部位数に基づいている。理想集団 (集団の個体数が一定であり、各個体がランダムに交配している集団) においては、突然変異に自然選択がはたらいていない場合 (すなわち中立である場合)、 π と θ の期待値は等しい。この 2 つの変異量の差をもちいて自然選択の有無を検定するための統計量が D である。

D は、2 つの変異量の差 (Difference) に由来する。しかし、集団遺伝学では、D といえば連鎖不平衡係数 (Coefficient of Linkage Disequilibrium) や遺伝的距離 (Genetic Distance) を示す。これらの D から区別するため、のちに Tajima's D

とよばれるようになった。

この統計量は、 π と θ の差に基づいているので、自然選択がはたらいていないと $D = 0$ が期待される。したがって、D が 0 から有意に異なっていると自然選択がはたらいていると予想される。さらに、遺伝的変異を積極的に維持する自然選択 (平衡選択: 超優性選択や頻度依存選択) がはたらいていると $D > 0$ となり、有害突然変異を排除しようとする自然選択 (純化選択) がはたらいていると $D < 0$ となる。したがって、どのような自然選択がはたらいているか、予想できる。考え方がひじょうに簡単であり、また DNA 多型を調べるだけで、D が計算できるため、広く使われるようになった。

D は本来自然選択の有無を知るための統計量であったが、現在では集団の特性を調べるためにもちいられてもいる。理想集団の要件の 1 つは集団の個体数が一

定であることだが、実際のところ個体数は、環境などの影響により増減する。集団の個体数が増加すると $D < 0$ となり、減少すると $D > 0$ となる。すなわち、D から過去におきた個体数の増減を推測できる。理想集団のもう 1 つの要件は、ランダムな交配である。集団構造 (集団が複数の分集団に分かれており、分集団間の移住が制限されている状態) があると、(ある個体は同じ分集団に属する個体とは交配しやすいが、別の分集団に属する個体とは交配しにくいので) 集団全体ではランダムに交配しているとはいえない。したがって、D は集団構造の有無を調べるために利用できる。理学系研究科では、分集団化している集団において自然選択がはたらいているといった、D の値に影響を与える要因が同時に複数ある場合について研究がなされている。