



### 「ラマン散乱」

加納 英明（化学専攻 准教授）

ラマン散乱の“ラマン”とは、インドの物理学者 C. V. Raman（ラマン）に由来する。ラマン散乱の最初の報告は1928年、Nature誌にて発表されたが、発見からわずか2年後の1930年に、ラマンにノーベル物理学賞が授与されている。当時の科学者達のオドロキぶりを反映しているようで、たいへん興味深い。受賞理由には "for the discovery of the effect named after him" という記載があり、その時点ですでに、この現象を語る上で“ラマン”という名前が欠かせない、ということになっていたようである。

さて、ラマン散乱とはどのような現象であろうか。通常の光散乱では、入射光と散乱光の波長は同じである。ところが、ラマン散乱で観測される光の波長は、

入射光とは異なり、波長が長くなったり短くなったりする。これは、光が分子によって散乱されるさい、その光子のエネルギーの一部が分子の振動エネルギー（回転 / 電子エネルギーのこともある）に奪われる、または、分子の振動エネルギーが光子のエネルギーに加算されるためである。その意味で、ラマン散乱とは、分子による光の“非弾性散乱”である、とも言えよう。通常の光の散乱にくらべて、ラマン散乱光は一般にひじょうに微弱な光である。

分子はさまざまな振動モードをもち、それらは異なる振動エネルギーをもつため、ラマン散乱光には多数の波長の異なる成分が含まれる。ラマン散乱光を分光すると、多数の鋭いバンドからなるラマン

スペクトルが得られる。このスペクトルは、分子やその構造に特有のパターンを示すため、ラマンスペクトルはしばしば“分子の指紋”とよばれる。

ラマン分光を用いると、生細胞を染めずに、分子の情報に基づいて可視化できるため、生命科学への応用も可能である。たとえば、化学専攻の瀧口宏夫研究室では、酵母生細胞中のミトコンドリアが活発に代謝活動を行っているときに現れるラマンバンドを発見しており、“生命のラマン分光指標”と名付け、そのバンドを与える未知分子の探索的研究を行っている。また、本理学系研究科地殻化学実験施設では、岩石中の天然ダイヤモンドや液体二酸化炭素を分析するためにラマン分光が用いられている。



### 「自由境界問題」

ヴァイス・ゲオグ（数理科学研究科 准教授）

偏微分方程式は、与えられた境界上で与えられた条件を満たすよう、その内部での解を求めるという問題設定が多い。これに対して「自由境界問題」は、与えられた偏微分方程式を未知な領域、つまり解がわからない限りわからない領域において解く問題である。その未知な領域の境界を「自由境界」とよぶ。

素朴な例は水面波である。水面波の場合には波の表面が自由境界になり、その自由境界の位置は、実験を行わない限りわからない。しかも時間とともに動いている。水面波についてはニュートン (Issac Newton)、ラプラス (Pierre-Simon Laplace)、ラグランジュ (Joseph-Louis Lagrange)、コーシー (Augustin-Louis

Cauchy)、ポアソン (Siméon Poisson)、ストークス (George Gabriel Stokes) などが研究したので、自由境界問題には300年間以上の伝統がある。偏微分方程式の中でもっとも基本となっているラプラス方程式さえもラプラスにより水面波のモデルから得られたものである。

もうひとつの例は、氷が溶けて水になる過程である。そのさい、氷と水の間のインタフェースの位置は自由境界となる。波の表面と同様に、このインタフェースも時間とともに動いている。固体の相と液体の相それぞれの温度が熱方程式の解であると仮定すればよいのだが、氷と水の間の自由境界上での境界条件については選択肢が多い。境界条件の選択によっ

て問題とパターン形成が変わってくる。よく知られている例には、古典ステファン問題、ギブズ-トムソン (Gibbs-Thomson) 法を用いたステファン問題、過冷却ステファン問題などがある。なお、自由境界は解に依存するので、各相の偏微分方程式が線形な場合にも、問題全体は非線形問題になる。

古典的な応用例のほかにも、腫瘍増大の数理モデル、ブラック-ショールズ (Black-Scholes) の市場モデル、さらにフィールズ賞受賞者のデヴィッド・マンフォード (David Mumford) が画像処理のために導き出したマンフォード・シャー (Mumford-Shah) 問題など、多彩な現象に応用されている。



## 「ミツバチの社会行動」

久保 健雄（生物科学専攻 教授）

ミツバチは社会性昆虫であり、血縁個体からなる集団（コロニー）を形成して生活する。ミツバチの「社会行動」の顕著な特徴として次の2つが挙げられる。1つは個体間分業であり、雌の成虫は巢に1匹だけ存在する女王蜂（生殖カースト）か、数万匹存在する働き蜂（不妊／労働カースト）に「カースト分化（同性内に起きる生殖や労働の分担の特殊化）」する。また働き蜂は羽化後の日齢に伴い、ローヤルゼリーを分泌して幼虫に与える「育兒」から、巢外で花蜜や花粉を採集する「採餌」へと分業する。もう1つは「ダンスコミュニケーション」である。働き蜂は、フリッシュ（K. V. Frisch）の発見で有名な「尻振りダンス」により、仲間に餌場の位置の情報を伝

達する。尻振りダンスは、暗号化された情報が伝達される「記号的コミュニケーション」の一種とされるが、ヒトの言語を含めて、記号的コミュニケーション能力は動物界では稀であり、昆虫ではミツバチがこの能力をもつ。フリッシュはこれらの業績により、1973年のノーベル生理学賞を受賞した。

ミツバチの社会行動の分子・神経基盤には不明な点が多い。2006年にはミツバチの社会性を遺伝子サイドから調べる狙いもあって全ゲノムが解読された。私たちは、神経興奮に伴って一過性に発現する初期応答遺伝子をミツバチから同定し、その発現を指標に、採餌蜂の脳では高次中枢（キノコ体）の一部で神経活動が亢進していることを見出した。

また1993年頃から、脳で領野・行動選択的に発現する遺伝子の網羅的同定（「分子的解剖」）を進めてきたが、最近、上の活動的領野で発現する候補遺伝子が同定された。また働き蜂の分業に伴い、キノコ体で核内（エクダイステロイド）受容体の一種の遺伝子発現が亢進することから、ステロイド情報伝達系のモード転換が分業のスイッチになる可能性を指摘している。ミツバチの社会行動を規定する神経回路を同定する上で重要な手がかりになることを期待している。

ミツバチでは1つのコロニーがあたかも1個体として振る舞う（生殖雌は女王蜂のみ）ため、順遺伝学の適応が難しい。遺伝子機能の解析のために遺伝子導入技術の確立が急務となっている。



## 「バイオマーカー」

荻原 成騎（地球惑星科学専攻 助教）

バイオマーカー（biomarker または biological marker）は、“生物指標化合物”と和訳されることが多い。本来のバイオマーカーとは、1800年代半ばのヨーロッパにおける石油成因の議論において、当時旗色の悪かった石油有機成因論者が、無機成因論に対抗するために、“石油中の生物起源有機化合物”として提唱した用語である。

狭義には、生物によってつくられたことが明らかなイソプレノイド骨格を持った有機分子について用いられた。現在では生物起源の有機物の中でも、起源を特定できる特徴的な有機化合物として用いられている。代表的なバイオマーカーとして、カロテノイドやプリスタン、フィタンなどの鎖式イソプレノイド化合物、テルペノイド、ステ

ロイドなどの環状イソプレノイド化合物、ポルフィリンなどのテトラピロール化合物が挙げられる。バイオマーカー分析は石油探査において重要な手法であり、有機物の熱履歴（有機物は熟成しているか）、堆積環境（酸化的または還元的）および起源（石油と成り得るのか）などの情報をもたらす。また、バイオマーカーの分布パターンは石油ごとに異なる。これは指紋領域ともよばれ、石油と石油、石油と根源岩を対比することによって、石油がどの根源岩に由来したかの推定が行われている。

バイオマーカーは、広い意味での分子化石であり、通常では化石としては残らない生物活動を推定する手がかりとなる。バイオマーカーの特徴は、有機分子で

あるため化石と異なり形態保存を必要としないこと、表層堆積物における物理化学反応に対して化石よりはるかに敏感であることである。また、バイオマーカーの種類はほとんど無限であり、時間的空間的に広い範囲で有機物質が検出されるため、地球の化学進化、発達史に新しい情報を提供する可能性を秘めている。

筆者らは、日本海より採取した堆積物柱状コアから“メタン湧出に敏感な嫌氣的メタン酸化古細菌由来のバイオマーカー”を分析することによって、メタン酸化古細菌活動度の時代変化復元を試みている。すなわち、メタンハイドレート融解にともなう地球温暖化、古環境変動解析の手段として、バイオマーカーを用いている。



## 「補償光学と究極の天体画像」 小林 尚人 (天文学教育研究センター 准教授)

補償光学とは、たとえば地球大気など不均一な媒質によって乱れた波面を補正して、望遠鏡のもつ最高の空間分解能(回折限界)でシャープな天体画像を得る技術もしくは装置のことを言う。このいわば“究極の天体画像”を得る技術は、常に画像の鮮明さを追求する天文学で最初に実用化された。

大気の下である地上からの天体観測は、プールの水の底から外をながめるようなもので、実は天体像は高速でゆらゆらしており、ゆがんだピンボケ状態で見えている。世界でもっとも星像が優れていると言われるハワイ・マウナケア天文台の「すばる 8.2 m 望遠鏡」であっても、通常は約 0.5 ~ 1 秒角(1 秒角は 3600 分の 1 度)に像がぼけており、大気の影響を受けないハッブル宇宙望遠鏡と比較すると、集光力では勝っていても分解

能は一桁も負けてしまう。

このピンボケを直して常にシャープな天体画像を得るといった夢のような技術が提案されたのは、意外に古く 1950 年代である。理想の点像であるべき参照星からの光の波面のゆがみを波面センサーでモニターし、そのゆがみをちょうど打ち消すかたちに光路中の鏡(可変形鏡)を毎秒ほぼ 1000 回の高速度で変形させることにより、安定した回折限界像を得ることができる。この技術が天文学において実用化されたのは 1990 年代で、現在では世界中のすべての 8 ~ 10 m 級の大型望遠鏡が常備するまでに普及している。

この技術は実際には、波長が長く波面補正が容易な近赤外線(1 ~ 5 ミクロン)波長域で用いられることがほとんどだが、十分に明るい参照星が天体のそばにあれば、約 0.05 ~ 0.1 秒角のハッ

ブル望遠鏡に匹敵する鮮明な画像を得ることができる。その結果、われわれの銀河系の中心にあるブラックホールの存在の証明や、ごく最近では系外惑星の直接撮像にまで成功しており、今後も数多くの最先端の成果が期待されている。

最近では、参照星がない天域での観測のために、地上から強力なレーザービームを上空 90 km にあるナトリウム原子の層に照射して、人工の星(レーザーガイド星)をつくる技術も実用化され、任意の天体の観測が可能となってきた。上記すばる望遠鏡では、天文学専攻(国立天文台)の家正則教授が中心になって開発した高精度な補償光学システムが稼働しており、筆者が開発に関わった補償光学専用の近赤外線撮像分光装置との組み合わせで、多数の科学的成果が定期的に得られている。



## 「データグリッド」 石川 裕 (情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 教授)

データグリッドはグリッドコンピューティングのひとつであり、グリッドコンピューティングについてまず説明する必要がある。グリッドコンピューティングという用語が公に知られるようになったのは、1997 年、米国 NSF Partnerships for Advanced Computational Infrastructure (PACI) のプログラムとして開始された National Technology Grid である。

グリッドコンピューティングは、グリッド本来の意味である電力網のように、国のインフラとして、インターネットワーク上の資源を高速ネットワークで提供するという発想から始まった。ここで、資源とは、計算、データ、実験設備などを指す。インターネットワークにつながっている資源を管理することから、

異なる運用ポリシーをもつ組織間での相互利用が仮定され、セキュリティ、ジョブスケジューラ、利便性、性能向上技術などの研究開発が行われている。Globus, Condor, Unicore, NAREGI などの運用ソフトウェアが開発されてきた。NAREGI は、文部科学省プロジェクトとして 2003 年度から 2008 年度まで行われた。

データグリッドはネットワーク上のデータの共有を目的とし、ここではデータの配置方法と高速転送技術が鍵となる。情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻の平木敬教授らはデータレゼボアールプロジェクトで遠距離高速データ転送に関する研究開発を行っており、2006 年には日本・アメリカ・オランダを結ぶ通信実験で理論限界の 99% に

あたる平均 9.08 Gbps の持続的利用を達成した。データレゼボアールシステムは、地球惑星科学専攻と地球シミュレータセンターおよび素粒子物理国際研究センターと高エネルギー加速器研究機構の間のデータ転送に実運用されている。

国際的なデータグリッド運用例としては、スイスにある CERN の高エネルギー物理実験施設やハワイに設置されているすばる望遠鏡などから得られる、大量データの国際的利用があげられる。たとえば、仮想天文台(Virtual Observatory)計画では、世界中に分散して存在する天体観測データから、検索と解析を可能とするシステムを開発し、2008 年 3 月から一般公開されている。