



量子生命科学会第 1 回大会 (量子生命科学研究会第 3 回学術集会)

講演要旨集

東京大学 弥生講堂 一条ホール

令和元年 5 月 23 日 (木) 10:00~18:30

共催： 一般社団法人量子生命科学会、国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構

量子生命科学会第1回大会の開催にあたって

今から 100 年前、量子論・量子力学が誕生し、人類は電子や光を自由に操ることができるようになり、私たちの日常生活は一変しました。これはしばしば「量子革命」と呼ばれています。そして 21 世紀に入り、量子通信や量子コンピュータといった分野を先頭に、量子現象を積極的に利用する、新たな量子技術の発展と人類社会の変革が期待されるようになりました。これが近年「第二量子革命」と呼ばれるようになったコンセプトであり、世界的な競争が始まろうとしています。この競争分野に「生命科学者」がどれだけ積極的に参画できるのか？そしてバイオ・医療分野にどれほどのイノベーションを起こせるのか？これが技術の側から見た「量子生命科学」の着眼点です。

逆に生命の側から見てみましょう。20 世紀、分子生物学の幕開けと同時に、X線結晶構造解析や電子顕微鏡などの新しい技術が急速に発展し、生命の理解が一気に深まりました。しかし、得られた情報の多くは「静的」なものであり、本来の姿から離れたものでした。つまり、個々の DNA やタンパク質が他の分子とどのように相互作用し、それは細胞内のどの部分でいつ起こるのか、組織や臓器の中では、どの細胞とどの細胞がどのタイミングでどのように連絡を取り合っているのか、そうした生き生きとしたダイナミックな情報が往々にして欠けていたのです。量子論・量子力学の視点や技術を用いて生命の謎の解明に迫るのが、量子生命科学です。

近年、量子センサーとして注目を集めているダイヤモンド NV センターは、iPS などの細胞の分化や、放射線を照射された細胞の応答や突然変異、がん化のプロセスといった、生きた細胞の内部を生きたままで観察する幅広い研究への貢献が期待されています。放射光や中性子による最新の分子構造解析技術は、生体内の分子の立体構造だけでなく、その動きや電子の振る舞いまでも明らかにすることが可能になりつつあります。また、量子力学の数学的枠組みや量子コンピュータは、脳における意識や認知のしくみを解明する際に威力を発揮すると考えられています。さらには、近年、そもそも生物が量子力学を利用しているという報告が知られるようになりました。例えば、植物の光合成でエネルギーが獲得されるしくみや、鳥の渡りに不可欠な磁気コンパスのしくみ、酵素反応や突然変異の過程などにおける光や電子や陽子の振る舞いに、量子の特性が利用されていることが推測されています。以上のことは、生命科学分野において、量子論・量子力学の視点や技術と無縁ではいられない、いわば「量子の目と手」が欠かせない時代が到来したことを示しています。まさに、量子生命科学の時代の幕開けです。そして量子生命科学を介して分子生物学では答えを得ることが出来ない「生命とは何か？」という根源的な謎に迫ります。さらに量子生命科学の知見は、情報処理や通信、あるいは様々なセンサー技術などの量子技術に新たな革新を引き起こす可能性も秘めています。

新たな元号と共に、量子生命科学研究会は「一般社団法人 量子生命科学会」として生まれ変わりました。生命科学の節目の年として歴史に刻まれることになることを確信しております。日本全体の研究者と力を合わせ、さらに海外の研究者をも引き込んで、この分野を牽引し、世界を先導していきましょう！

令和元年 5 月 23 日

一般社団法人 量子生命科学会 会長 平野俊夫
(量子科学技術研究開発機構 理事長)

量子生命科学会第1回大会(量子生命科学研究会第3回学術集会)

プログラム

2019年5月23日(木)

会場: 東京大学弥生講堂一条ホール

- 10:00 – 10:15 (15) 会長あいさつ 平野 俊夫 (量研 理事長)
- 10:15 – 10:25 (10) 来賓あいさつ 松尾 泰樹 (文科省 科学技術・学術政策局長)
- 10:25 – 11:10 (45) 【基調講演1】
量子生命科学への期待
佐藤 文隆 (京都大学名誉教授)
- 11:10 – 12:40 (90) 【セッション1】 NV センター
- 1) 量子ビームを活用したダイヤモンド中への窒素－空孔(NV)形成
大島 武 (量研)
 - 2) 量子技術を用いた NV 中心量子センサの高感度化研究
水落 憲和 (京都大学 化学研究所)
 - 3) NV センターの生命科学計測への応用
原田 慶恵 (大阪大学 蛋白質研究所)
 - 4) 量子生命科学における固体量子センサの可能性
波多野 睦子 (東京工業大学)
- 12:40 – 13:10 (30) 学会設立集会
- 13:10 – 13:50 (40) 昼休み(ポスターセッション／ 評議委員会)
- 13:50 – 14:35 (45) 【基調講演2】
量子情報と量子生命
北川 勝浩 (大阪大学大学院 基礎工学研究科)
- 14:35 – 15:20 (45) 【基調講演3】
量子生命科学への量子化学によるアプローチ
中辻 博 (京都大学名誉教授)

15:20 – 15:45 (25) 休憩 (ポスターセッション)

15:45 – 17:00 (75) 【セッション 2】磁気受容タンパク

- 1) 動物における地磁気受容の仕組みと磁気受容体候補分子クリプトクロム
岡野 俊行 (早稲田大学 理工学術院)
- 2) タンパク質分子系の光磁気感受と制御
前田 公憲 (埼玉大学 理工学研究科)
- 3) 青色受容タンパク質クリプトクロムの多様な機能と磁気感受応答に関する
理論的アプローチ
重田 育照 (筑波大学 計算科学研究センター)

17:00 – 17:30 (30) 休憩 (ポスターセッション)

17:30 – 18:30 (60) 若手パネルディスカッション

講演者: 尾瀬 農之(北大)、衛藤 雄二郎(産総研)、山田 真希子(量研)
登壇者: 増山 雄太(量研)、重田 育照(筑波大)、西郷 甲矢人(長浜バイオ大)
司会者: 小林 隆司(物材機構)

18:30 閉会

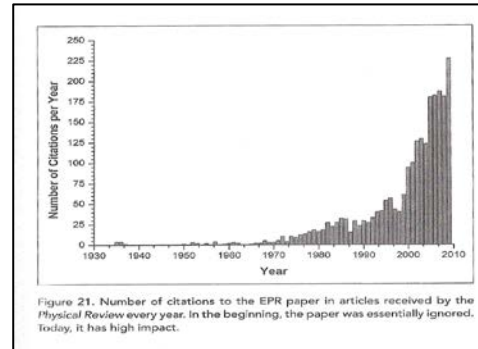
18:45 – 懇親会 (弥生講堂 アネックス セイホクギャラリー)

量子生命科学への期待

佐藤文隆

I 量子力学の新時代

プランク作用量子論は(1900)、アインシュタイン・ボーアらの前期量子論を経て1927年、ハイゼンベルグ・シュレーディンガーらの量子力学に結実(1925-27)。アインシュタインはEPR論文(1935)で反対を表明。その引用数が2000年頃から急上昇。「第二次量子革命」が起こっている。マクロのentanglementが鍵。



II 問わねば応答なし

「傍観者」から「参加者」へ、因果から相関へ、データサイエンスの手法へ「重なった」の意味、推論の合理化としてのベイズ統計

III 「無人科学」から「有人科学」へ

「世界を自分をとうして知る」と「自分を世界をとうして知る」
量子化学を超えて、「光子+原子分子」から「光子+原子分子系」へ

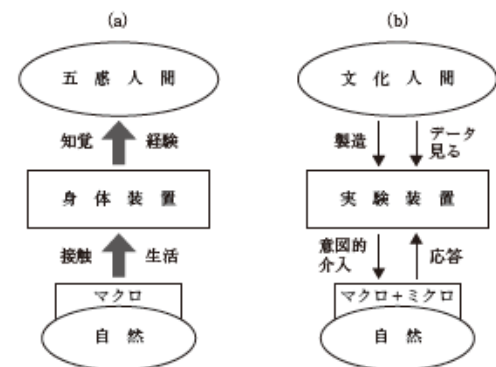
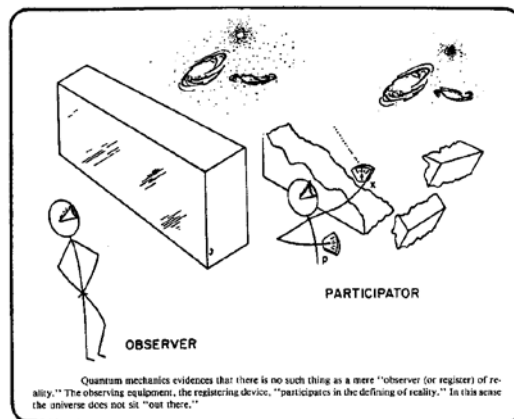


図0-4 五感人間と文化人間 自然の中の生活で五感人間はマクロ自然を認識するが、文化人間はミクロ自然を実験装置を通して認識する。

参考

佐藤・井元信之・尾関章『量子の新時代』朝日新書

佐藤文隆『量子力学ノート』サイエンス社

『佐藤文隆先生の量子論』講談社ブルーバックス

佐藤文隆『量子力学が描く希望の世界』青土社

量子ビームを活用したダイヤモンド中への窒素－空孔(NV)形成

量子科学技術研究開発機構 大島 武

近年、ダイヤモンド中の負に帯電した窒素－空孔 (NV) の発光・スピンといった量子状態を制御することで量子コンピュータ、量子情報通信や量子センシングといった量子科学技術を実現する試みが活発になされている。これら量子科学技術では、要求される NV 濃度や位置制御は様々であり、単一から多量な NV を自在に形成する技術確立する必要がある。我々は、電子やイオンビームといった量子ビームを活用してダイヤモンド中に効率的に高品質な NV を形成する技術を開発している。

超高感度な量子センサ応用では、高濃度な NV 形成が要求されるが、その場合は N を含有するダイヤモンドに電子線照射により空孔を形成し、その後、熱処理をすることで NV を形成している。特に高濃度 NV 形成では多量の空孔形成、即ち、高線量の電子線照射が必要であるが、高線量照射ではダイヤモンドの結晶損傷も大きくなり、熱処理を行ってもダイヤモンドの結晶性が回復しない。そこで電子線照射による結晶損傷を最低限に抑制し、且つ、電子線照射中に NV を形成することが可能な高温電子線照射技術を開発している (図 1)。一方、少量の NV 形成では高純度ダイヤモンドに N イオン注入により N を導入し、熱処理を施すことで NV 形成を行っている。これまで、熱処理温度といった NV 形成プロセスを最適化することで、イオン注入により形成した NV では世界最長のスピン緩和時間 (T_2) 1.8ms を達成している[1]。数の制御では、単一 N イオン入射を用いることで単一 NV の形成、 N_2 分子イオン注入を行うことで NV ペアの形成、更には、N を複数含む分子であるアデニンイオン注入を用いることで相互作用し合う 3 つの NV 形成にも成功している[2-4]。講演では我々が行ってきた量子ビームを活用した NV 形成、及び形成された NV の性質について紹介する。



図 1 高温電子線照射装置

本研究は MEXT, Q-LEAP と CAO, PRISM の支援を受けております。

参考文献

- [1] T. Yamamoto et al., Phys Rev B **88**, 075206 (2013).
- [2] T. Yamamoto et al., Phys. Rev. B **90**, 081117(R) (2014).
- [3] T. Yamamoto et al., Phys. Rev. B **88**, 201201(R) (2013).
- [4] M. Haruyama et al., Nat. Commun., *accept for publication*.

量子技術を用いた NV 中心量子センサの高感度化研究

水落 憲和

(京都大学 化学研究所)

我々は研究開始当初、NV 中心が持つ優れたスピンの特性に注目し、研究を行っていた¹⁻⁴⁾。主に同位体濃度を制御した試料を用い、 T_2 の長時間化とその機構解明^{1,2)}、核スピンを用いた多量子ビット化の研究^{1,3)}等を行ってきた。単一 NV 中心を用いた磁気センサの研究では、同位体濃度を制御したダイヤモンド試料において、単一 NV 中心における当時としては世界最高の AC 磁場感度を示していた²⁾。近年はそれらに加え、スピン、光子、電荷の間の量子インターフェースとしての役割を NV 中心が担えるのではないかという観点から、スピン、単一光子発生、電荷状態の電氣的制御にも注目して研究を行っている^{5,6)}。これらは将来の電子デバイス実現に向け、電氣的制御に資する技術と考えている。また、アンサンブル系におけるセンサ感度向上に向け、近年、N-V 軸の方向制御と機構解明にも成功していた⁷⁾。

講演では NV 中心を用いたセンサの原理などに加え、近年の我々の取り組み等を紹介する。近年、我々は古典物理では実現できない量子状態を用いた高感度化に向け、量子ハイブリット系を用いた研究に取り組んでいた。電子スピンと核スピンを用いた系⁸⁾や、電子スピンとマイクロ波を用いた系⁹⁾において、桁違いに感度が向上することを理論的に示した。最近、産総研で合成してもらった試料を用い、室温での単一 NV 中心における世界最高の AC 磁場感度が得られた実験結果¹⁰⁾など、最近の成果についても述べさせて顶きたい。

我々のグループにおける研究成果には産総研、金沢大、東工大、ドイツ・シュトゥットガルト大学等との共同研究が含まれ、本研究は科研費・新学術、Q-LEAP, PRISM、OPERA 等の支援を受けております。

参考文献

- (1) N. Mizuochi, et al., Phys. Rev. B, 80, 041201(R) (2009). (2) G. Balasubramanian, NM, et al., Nature materials, 8, 383 (2009). (3) P. Neumann, N. Mizuochi, et al., Science, 320, 1326 (2008). (4) 水落憲和、応用物理, 87, 251-261(2018). (5) N. Mizuochi, et al., Nature Photonics, 6, 299-303 (2012). (6) Y. Doi, NM, et al., Phys. Rev. B. 98, 081203 (2016), (7) T. Fukui, NM, et al., Appl. Phys. Exp., 7, 055201 (2014). (8) Y. Matsuzaki, T. Shimo-Oka, H. Tanaka, Y. Tokura, K. Semba, N. Mizuochi, Phys. Rev. A, 94, 52330 (2016). (9) H. Morishita, T. Tashima, D. Mima, H. Kato, T. Makino, S. Yamasaki, M. Fujiwara, N. Mizuochi, submitted. (10) E. D. Herbschleb, H. Kato, Y. Maruyama, T. Danjo, T. Makino, S. Yamasaki, I. Ohki, K. Hayashi, H. Morishita, M. Fujiwara, N. Mizuochi, submitted.

NV センターの生命科学計測への応用

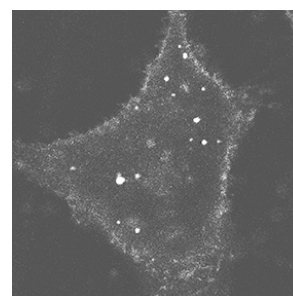
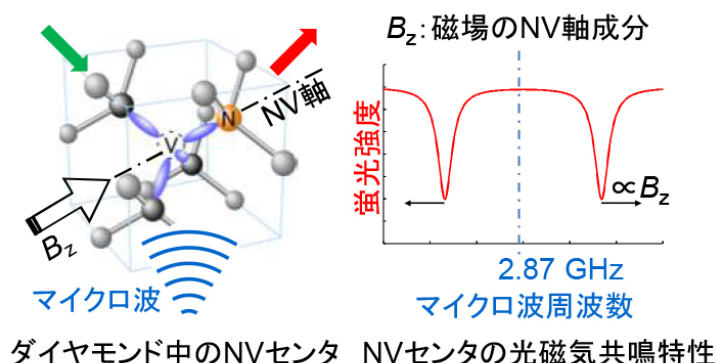
原田 慶恵¹, 外間進悟¹, 波多野雄治², 波多野睦子²

大阪大学蛋白質研究所¹, 東京工業大学工学院²

生命科学分野における蛍光観察では様々な蛍光分子プローブが用いられてきた。最近、ダイヤモンド結晶内の窒素-空孔蛍光中心(NVC)を新規蛍光プローブとして利用する研究が注目を集めている(図左)。NVC は、ダイヤモンド自身の持つ生体親和性の高さに加えて、蛍光が退色しない、光励起によるスピン偏極および光検出によるスピン計測(光検出磁気共鳴、ODMR、図中)が可能であるといった他の蛍光体にはない優れた特徴を有する。このため単なる蛍光プローブとしての利用にとどまらず、磁場・電場・温度などの環境因子を局所的に計測する研究が進められている。静磁場の変化は、ODMR 周波数の変化として捉えることができ、原理的には数十 $\text{fT}/\sqrt{\text{Hz}}$ という超高感度が期待されている。また、NMR でよく知られたスピンエコー法と組み合わせることにより、一原子の核スピンさえ検出可能であることが理論的に示されている。

NVC の生体計測への適用方法としては、NVC を含むダイヤモンドナノ粒子(FND)を細胞や生体分子に導入する方法(図右)と、NVC が含まれるダイヤモンド基板をカバーガラスの代わりにして近接させる方法がある。FND を用いる方法として、これまでに FND 自身の並進・回転運動を介して生体の運動の観察および細胞内温度の計測に成功している。一方、単一のタンパク質や細胞の観察に板ダイヤを用いる場合には、観察対象を磁気ビーズあるいはスピンラベルで標識するとともに、これら磁気プローブのサイズや板ダイヤ表面からの距離に応じて NVC を板ダイヤ表面のごく浅い層に集中させることが重要である。

講演では、2つの方法を生体観察に応用した最近の実験結果を紹介する。



FND を取り込んだ HeLa 細胞の共焦点顕微鏡像

量子生命科学における固体量子センサの可能性

東京工業大学

波多野 睦子

ダイヤモンド中の NV センタ(窒素－空孔対)は、常温大気中で単一スピンを操作・検出することが可能で、その状態を光検出磁気共鳴でイメージングできる特徴がある。本講演では、NV センタの量子効果に基づく特異な現象、工学的な見地から感度と安定性の向上に必要な、材料、デバイス、量子プロトコル計測のコア技術を説明する。さらには固体量子センサの特長を活かした、量子生命科学の新領域における応用の可能性を紹介する。(Table 1)

NV センタはアトミックスケールの構造であることから、計測対象はナノからミクロンスケール、さらにミリメートル以上の領域まで、スケーラブルな高感度センサとして動作する。集団(アンサンブル)の NV センタを用いることにより、室温で SQUID センサ並みの磁気感度も原理的に期待できるほどの優れた潜在能力を有する。計測対象に合わせたダイヤモンドセンサの最適な構造は、CVD 法や、イオン注入法、電子線照射等の半導体プロセス技術により実現される。さらに高感度なセンサの計測には、NV センタのスピンコ

ヒーレンス時間が非常に長い特長を活かし、

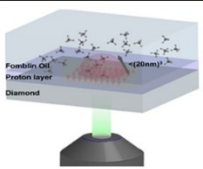
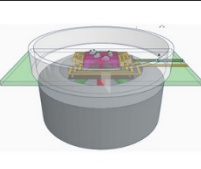
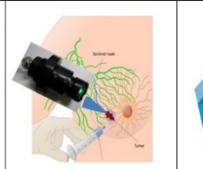
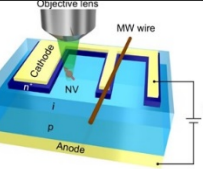
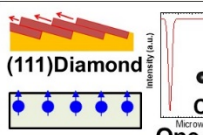
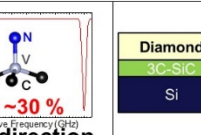
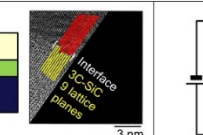
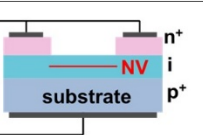
「量子」ならではのプロトコルが適用できる。具体的には、パルス磁気共鳴法(ダイナミカルデカップリング法)を用いて、ナノスケール空間分解能で NMR とそのイメージングが可能となる。

本研究は MEXT,Q-LEAP と CAO, PRISM の支援を受けております。

参考文献

- 1) H. Ishiwata, TI, MH et al., APL (2017), 2) Y.Hatano, TI, MH, YH et al., physica status solidi (a) (2018), 3) T. Iwasaki, MH et al., ACS nano (2017), 4) T. Fukui, NM et al., APEX 7, 055201(2014), K. Tahara, TI, MH et al., APL 107, 193110 (2015), H. Ozawa, MH, TI et al., APEX 10, 045501 (2017),5)T. Suto, TI, MH et al., APL 110 (2017), 6) M. Shimizu, T. Makino, MH, APEX (2018)

Table1 Applications of diamond quantum sensors and technology platform for material and devices

Applications			
			
Nano-NMR ¹⁾	Magnetic particle imaging ²⁾	Metastasis diagnosing	Device sensing ³⁾
Platform : Material and devices			
			
Selectively aligned, high-density CVD ⁴⁾	One aligned, high-density CVD ⁴⁾	Growth on Si for large-area ⁵⁾	Charge control by device design ⁶⁾

量子情報と量子生命

大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

大阪大学先導的学際研究機構 量子情報・量子生命研究部門長

北川勝浩

kitagawa@ee.es.osaka-u.ac.jp

量子生命科学会第1回大会の基調講演に相応しいかどうか迷いましたが、むしろ、本学会には量子情報分野から来られている方は少ないのではないかと考え、部門の紹介と量子情報から見た量子生命について述べたいと思います。

大阪大学は昨年7月1日に先導的学際研究機構に量子情報・量子生命研究部門を設置しました。大阪大学の量子情報研究者数(図1)は、私が着任した1993年から26年間で26倍に増えました。この間に多くの競争的研究資金をいただき、多くの優秀な博士を育てることができました。量子情報は量子物理学と情報科学・計算機科学という極めて異質な学問間の学際融合分野で、誕生から既に四半世紀以上経ちますが、まだ大学院に量子情報専攻は存在しません。IBMやGoogleの参入により、ここ数年世界的に量子コンピュータへの期待が高まっていますが、誤り耐性

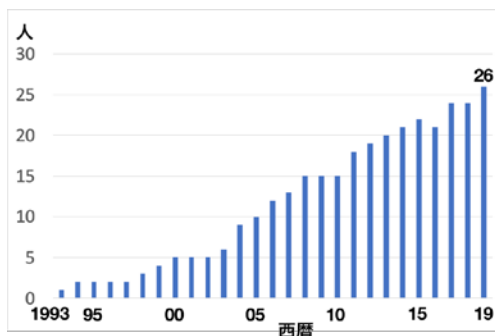


図1 大阪大学の量子情報研究者数

をもつ実用的なものは30年程度かかると予想されており、人類はまだその入口に立ったに過ぎません。

シュレディンガーなど多くの著名な量子物理学者が生命科学に挑んで来ましたが、近年は量子情報からの貢献も顕著です。生命への量子の関与を解明する量子情報、量子化学、生命科学の学際研究、量子で生命を観る量子情報、量子物理、生命科学の学際研究に、総合大学の強みを活かして挑戦して行きます。

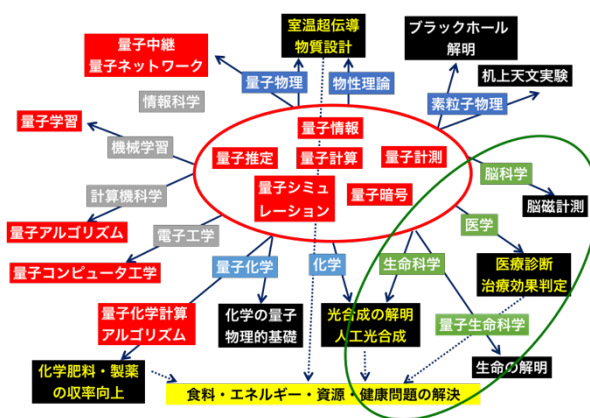


図2 量子情報・量子生命の波及効果

量子生命科学への量子化学によるアプローチ

中辻 博

量子化学研究協会研究所 (QCRI)

606-8305 京都市左京区吉田河原町 14、京都技術科学センター16

www.qcri.or.jp, h.nakatsuji@qcri.or.jp

京都大学名誉教授

本大会の広告の冒頭に「量子生命科学とは、量子論・量子力学を基盤とした視点から生命全般の根本原理を明らかにすると同時に、、、」とある通り、量子力学が化学・生物学・生命科学の基盤となる原理を提供していることは間違いない。中でもシュレーディンガー方程式がその基礎方程式をなしている。従ってこの方程式を正確に解く事ができればこれらの分野を理論的に研究する上で大きな武器になることは容易に想像される。しかしながら、この方程式を正確に解く一般的な方法は演者が 2004 年に発見するまで知られず、この方程式はむしろ解けないとすら考えられていた。演者らはその一般的な理論(自由完員関数理論、Free Complement (FC) theory)に基づいて化学や生物学の研究に有用な予言的量子化学を作り上げるべく QCRI において努力を重ねている[1]。まずその一端について述べる。

この研究に先立ち、中辻らは光が関与する化学を研究するための比較的正確な理論、SAC-CI を 1978 年に提案した。この理論は励起状態の量子化学を容易に信頼度高く行うことのできる世界初の理論である。中辻と長谷川らはこの理論を多くの光生物化学の現象に応用した。例えば、紅色細菌の光合成反応中心における光による電荷分離のメカニズムを世界で初めて量子論の力で合理的に解明することができた。また、ヒトの視覚の問題、つまり、目の中で色を感じるメカニズムは何かをやはり SAC-CI 理論を用いて解明した。このような研究によって理論を用いて mutation を行う指導原理を知ることができる。例えば、蛍の光を薄黄色から赤に変えることは原理的には極めて容易である[2]。

より最近になって Circular Dichroism (CD) Spectra が生物中の比較的弱い相互作用を鋭敏に反映する事、また SAC-CI 理論が CD spectra を精度よく与えることから、これに関係する研究を宮原、杉山らと共に行った。例えば、核酸の絶対配座に係る弱い相互作用の nature を明らかにした。このことから、CD Spectra を使って弱い相互作用系の構造を推定することもできることを明らかにしている。また、CD Spectra の研究で良く用いられる Td-DFT 法はあまり信頼できないので注意が必要であることも示した[3]。

このような研究の中からいくつかの研究例を示す。量子化学的研究が量子生命科学の研究、特に「何故か」を知るうえでとても有用であること、そしてそのさい信頼できる理論を使うことがいかに大切であるかをお話したい。その意味でも、現在展開中のシュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく予言的な量子化学をできるだけ早く作り上げて、化学者・物理学者・生命科学研究者の皆さんの利用に供したいと努力している。

[1] PRL, 93, 030403 (2004); Acc. Chem. Res. 45, 1480 (2012); JCP, 142, 194101 (2015); 149, 114105, 114106 (2018) [2] JCP, 68, 2053 (1978); CPL, 59, 362 (1978); 67, 329, 334 (1979); JPC, B102, 10410, 10420 (1998); BCSJ, 82, 1140 (2009); JACS, 129, 8756 (2007) [3] JPC, A117, 42, 14065 (2013); A119, 8269 (2015), A120, 9008 (2016); JPC, A122, 100 (2018).

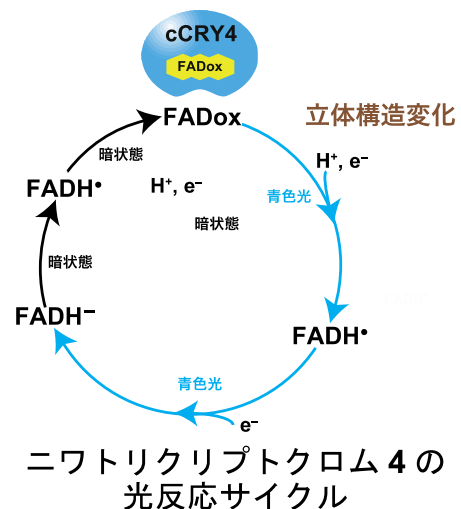
動物における地磁気受容の仕組みと磁気受容体候補分子クリプトクロム

岡野 俊行（早稲田大学 理工学術院 電気・情報生命、先端生命医科学センター）

コマドリなどの渡り鳥をはじめ、多くの動物が地磁気を受容し、渡りや帰巣といった重要な行動に利用していることが明らかとなってきた^{1,2)}。これまでに、動物個体を用いた行動生理学的実験から、青色光受容分子であるクリプトクロム（Cryptochrome, CRY）が網膜に存在し、磁気受容タンパク質として機能する可能性が強く示唆されている。CRY が磁気を受容する分子機構の詳細は未だ不明であるが、近年の CRY タンパク質を用いた生物物理学的研究によって、発色団フラビンアデニンジヌクレオチド（FAD）の光受容に伴って、CRY 分子内に生じるラジカル対を利用するというラジカルペア機構(Radical Pair Mechanism, RPM)が示唆されている。RPM では、ラジカルペアの電子スピン状態に対する磁気効果が発端となって生化学的な経路が分岐し、結果として生じる活性中間体の量が磁気の方

向や強さを反映すると想定されているが、実際に生体内において RPM が働いているかどうかは不明な点が多い。

CRY は、紫外線による DNA 損傷を修復する光回復酵素と共に、遺伝子ファミリーを形成している。特に鳥類では、CRY1, CRY2, CRY4 の 3 つの遺伝子が存在する。我々は以前より、ニワトリのこれら CRY の分子解析を行い、ニワトリ CRY4 (cCRY4)が松果体や網膜に高発現していることを見出していた³⁾。このことから、cCRY4 が磁気受容分子の候補と考え、網膜内での発現および光応答性を明らかにした⁴⁾。また、cCRY4 の分子機能を探るために、酵母を用いた大量培養系ならびに高純度精製系を確立し、分光解析により光サイクルを調べ、長寿命ラジカル中間体の生成を見出した [図]⁵⁾。



これらの結果は、鳥類において CRY4 が磁気受容体として機能するという仮説と合致するものの、決定的な証拠はなく、未解決の問題が山積している。たとえば、cCRY4 と共に cCRY1 も磁気受容体候補とされている。また、RPM では、網膜細胞内における CRY の分子配向が重要と考えられているが、そういった構造は未発見である。さらに、CRY の下流の情報伝達経路も未知である。

本発表では、上記の背景および研究成果を踏まえながら、動物における地磁気受容能に関する研究と今後期待される研究について概説する。

References: [1] Takebe *et al.*, *Sci. Rep.* 727 (2012), [2] 岡野・三井, 現代化学 545 (2016), [3] Kubo *et al.*, *J Neurochem* 97, 1155 (2006), [4] Watari *et al.*, *J Biol Chem* 287, 42634 (2012), [5] Mitsui *et al.*, *Biochemistry* 54, 1908 (2015).

タンパク質分子系の光磁気感受と制御

前田公憲

埼玉大学・理工学研究科

Graduate School of Science and Engineering, Saitama University

E-mail: kiminori.maeda@mail.saitama-u.ac.jp

近年多くの動物でその磁気を感じる能力が言われ、そのメカニズムに注目が集まっている。その中においてマグネタイト説と並んで、光励起による電子移動反応に対する磁場効果の異方性を、渡り鳥などが磁気コンパスとして利用しているという説が言われ、多数の実験的な状況証拠がそのことを支持している。ラジカル対の磁場効果については古くから研究がなされているが、鳥のコンパスに利用されている可能性と、このラジカル対のスピンダイナミクスに対する磁場効果が、特に地磁気レベルの小さな磁場において、極めて量子力学的なスピン運動の相関ダイナミクスによるものであることから、所謂量子バイオロジの重要なテーマと考えられている[1]。

動物の磁気感受に関しては重要なタンパク質とされるクリプトクロムが注目されており、図に示すようなラジカル対のメカニズムが提唱されている[2]。過去に講演者らは、クリプトクロムの分光測定により、ラジカル対が理論的な予想にかなった磁場応答を示すことを観測している[3]。しかし、より詳細な磁場に対する異方的な応答や、その後のシグナルの伝搬についての理解は進んではいない。講演者らはそれらのチャレンジに備えて、より高感度かつ安定な測定可能な装置開発とともに、1). より一般的なタンパク質表面におけるラジカル対の運動や、バインディングポケットの効果に着目した磁場効果観測、2). 鳥などの磁気感受に対する、電磁波の効果を詳細にモデル化するための理論、実験からの多角的検討とラジカル対制御の新しいエンジニアリング法、などの研究を進めている。

これらの成果から、より精密にラジカル対を観測しその磁場効果を得る準備が出来つつあり、現在研究室でのクリプトクロム合成も進めている。

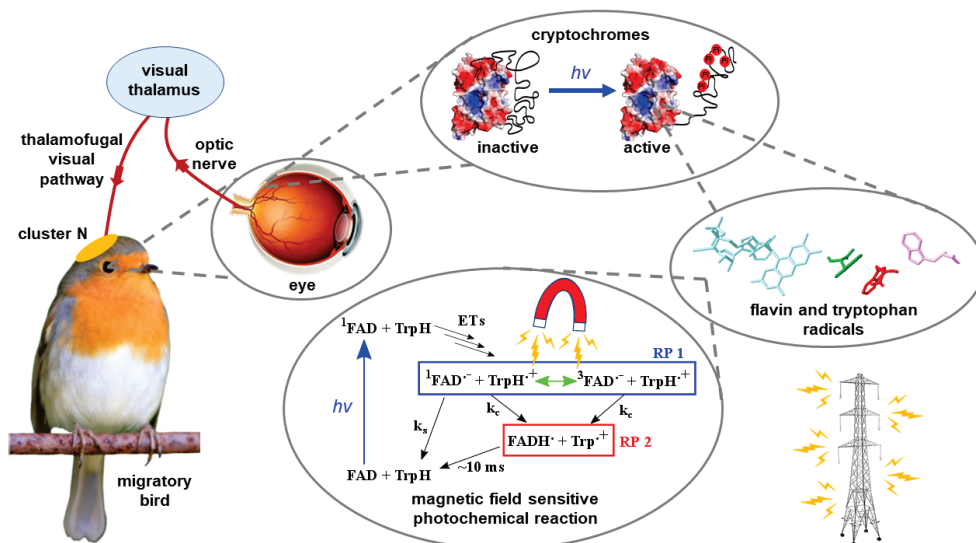


図1.鳥のコンパスのモデルとして提唱されているモデル(Ref. 2と3を基に作成)

References

- [1] “The dawn of the quantum biology” by Philip Ball: *Nature* **474**, 272-274, (2011).
- [2] T. Ritz, et al., *Biophys. J.* **78**, 707(2000).
- [3] K. Maeda et al., *PNAS*, **109**, 4774(2012).

青色受容タンパク質クリプトクロムの 多様な機能と磁気感受応答に関する理論的アプローチ

重田育照¹、鬼頭-西岡宏任^{1,2}

¹筑波大学計算科学研究センター、²JST さきがけ

捕食場所の確保や産卵・繁殖のために季節的な長距離移動をする生物が数多く存在する。典型的な例である鳥、サケ、およびミツバチなどは、その体内にコンパスのようなモノ（器官、細胞、タンパク質、物質??）が備わっていて、地磁場を感知することで方角を決めているのではないかと古くから考えられていた。実際にそれらの生物の生体中にはマグネタイト（Fe₃O₄）などの生体内磁石を持つものも実験的に明らかになっていて、マグネタイトが関わっているのではないかと推察されていた。

K. Schulten らは早くから生体内の磁気感受性について理論的なモデルを構築し、生体内で生じたラジカルペアのコヒーレンスが地磁気の微妙な差異の影響を受けることを提案した[1, 2]。のちにこのモデルを改め、コマドリ等目の中に存在する青色受容タンパク質であるクリプトクロムが関与すると考え [3]、これまで様々な理論計算を行なっている。クリプトクロムは様々な生物の中で見出される、極めて一般的なフラボタンパク質であり植物の伸長成長の制御や概日リズムなど多様な機能を有する。またその類縁体であり進化的に上流にいるフォトリアーゼはDNA回復能を持つ。

これまで我々は、フォトリアーゼ、および回復能を失ったクリプトクロムDASHのDNA回復能の違いに着目し、分子動力学計算による複合体構造のモデリング、および、フラグメント分子軌道法による相互作用解析、並びに実験結果と付き合わせて、回復能の有無と構造機能相関について定性的な議論を行ってきた [4, 5]。

本講演ではそれらの取り組みを述べるとともに、最近に発見された DNA 紫外線損傷修復の磁場効果や、人工的フラボ蛋白質の磁場応答を調べるための理論計算の結果を紹介する。特に、ラジカルペア対を形成する分子を X 線結晶構造から切り出し、Gaussian 16 および ORCA などの第一原理計算に基づく電子状態理論により超微細結合定数を計算し、その値を用いて Matlab の Spinach ライブラリでスピン量子ダイナミクスをシミュレーションする方法など、最新の理論計算手法についての解説も行う。

参考文献

1. K. Schulten, H. Staerk, A. Weller, H.-J. Werner, B. Nickel. *Z. Phys. Chem.*, **101**, 371-390 (1976).
2. K. Schulten, C.E. Swenberg, A. Weller. *Z. Phys. Chem.*, **111**, 1-5 (1976).
3. T. Ritz, S. Adem, K. Schulten, *Biophys. J.* **78**, 707-718 (2000).
4. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, *Biophys. Physicobiol.* **13**, 311-319 (2016), *ibid* **15**, 18-27 (2018).
5. Y. Terai, et al., *Nucl. Acid Res.* **46**, 6761-6772 (2018).

【若手パネルディスカッション】

討論内容

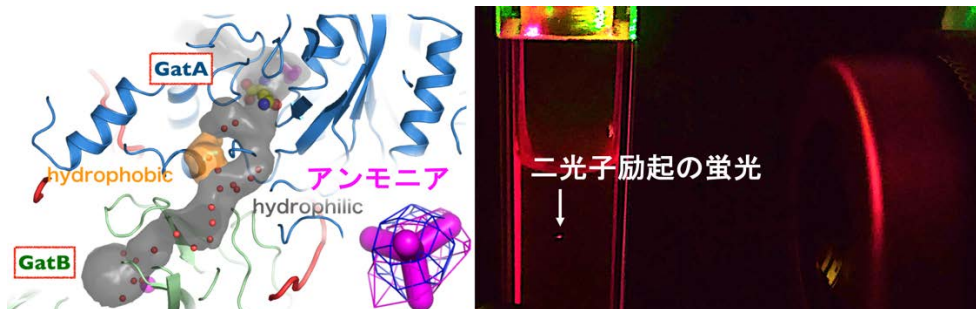
「量子生命科学」の研究者は、今まさに、各々が独創的なアイデアで新たな学問領域を生み出そうとしている。そして、これまで解決困難だった生命科学の諸問題に対して、量子の視点で全く新しいアプローチの提案を試みている。

たとえば、量子技術は生命科学に残る「水素」の謎を解明してくれるかもしれない。生命を原子の集まりと考えると、水素は私たちの体の 60%を占める重要な元素である。体の中で酵素などのタンパク質分子が機能するときも、分子の中の水素原子の位置が極めて重要である。それにもかかわらず、分子構造の中の水素の位置を特定することはとても難しく、既存技術では水とアンモニアの区別すらままならない。しかし、この課題は「中性子線」という量子技術により克服されつつある。

また、量子技術は「顕微鏡は組織表面しか観察できない」という常識を覆すかもしれない。二光子励起という現象を利用すれば、組織表面に邪魔されず深部を観察できることは既に広く知られている。しかしこの方法は、強力なレーザーを用いるため、組織に大きなダメージを与えるという問題があった。「量子エレクトロニクス技術」を用いてレーザー光を制御すれば、二光子励起が起こるレーザー強度を桁違いに小さくできる。これにより、脳の奥深くの細胞の働きまで詳細に解析できるようになるだろう。

更に、量子技術の活用以外の側面からも量子生命科学のアプローチは試みられている。たとえば、人間の思考や判断といった認知機能は、普通の確率論では正確に予測することができない。このため、認知機能は古典的な生命科学では取り扱うことが難しい不可解な生命現象とされてきた。しかし近年になって、量子力学の統計問題を扱うために発展した「量子確率論」を使うことで、古典確率論よりも正確に認知機能を予測できることが明らかになりつつある。

このように、一口に「量子生命科学」といっても専門性は多岐に渡る。従って量子生命科学が学問として裾野を広げるためには、分野の垣根を超えたコミュニケーションが不可欠である。そこで、構造生物学、イメージング、認知科学と全く異なる3分野から量子生命科学の研究者を壇上に迎え、量子生命科学は今どうあるべきかを討論する。NIMS 広報室チーム長の小林隆司さんの司会で、基本事項への質問も交え、異分野間の意思疎通を図るため可能な限り平易な言葉で討論を行う。



(左) 中性子線を用いて解かれたアンモニアの構造

(右) 量子エレクトロニクス技術に基づく光源による二光子励起の蛍光

■後援機関一覧:

文部科学省
応用物理学会
電子スピンスイエンズ学会
日本宇宙生物科学会
日本核磁気共鳴学会
日本癌学会
日本環境変異原学会
日本結晶学会
日本再生医療学会
日本組織培養学会
日本磁気共鳴医学会
日本神経科学学会
日本神経精神薬理学会
日本生化学会
日本生物学的精神医学会
日本生物物理学会
日本蛋白質科学会
日本中性子科学会
日本脳循環代謝学会
日本農芸化学会
日本ヒト脳機能マッピング学会
日本分子イメージング学会
日本分子生物学会
日本放射線影響学会
日本マイクロビーム生物研究会
光科学異分野横断萌芽研究会
ヒト脳イメージング研究会

量子生命科学会第1回大会(量子生命科学研究会第3回学術集会)実行組織

大会組織委員:

[委員長]須原哲也、五十嵐龍治、小西輝昭、藤巻秀

プログラム委員:

玉田太郎、河野秀俊、安達基泰、赤松憲、鹿園直哉、横谷明德、大島武、
五十嵐龍治、小西輝昭、今岡達彦、青木伊知男、山田真希子、八幡憲明

事務局:

[局長]藤巻秀、川野光子、今岡達彦、伊藤悦子、小坂道子、足立恵美子、三嶋武、磯田直子

3rd QST International Symposium



Quantum Life Science

4-5 December 2019
Nara Kasugano
International Forum

Speakers

Peter Hore (University of Oxford, UK)

Toshiyuki Okano (Waseda University, JPN)

Murali Krishna Cherukuri (NIH, USA)

Brant Gibson (RMIT University, AUS)

and others

第3回 QST 国際シンポジウム「量子生命科学」開催のお知らせ

■主 催: 量子科学技術研究開発機構

■日 時: 2019 年 12 月 4 日(水)、5 日(木)

■会 場: 奈良春日野国際フォーラム 薨〜I・RA・KA〜

■参加費: 無料

■問合せ先: qstsympo2019@qst.go.jp