

宇宙生命計算科学連携拠点

梅村 雅之

筑波(つくば)大学 計算科学研究センター



先端計算科学

素粒子

原子核

物質

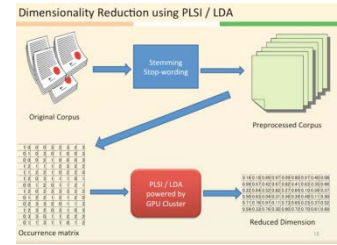
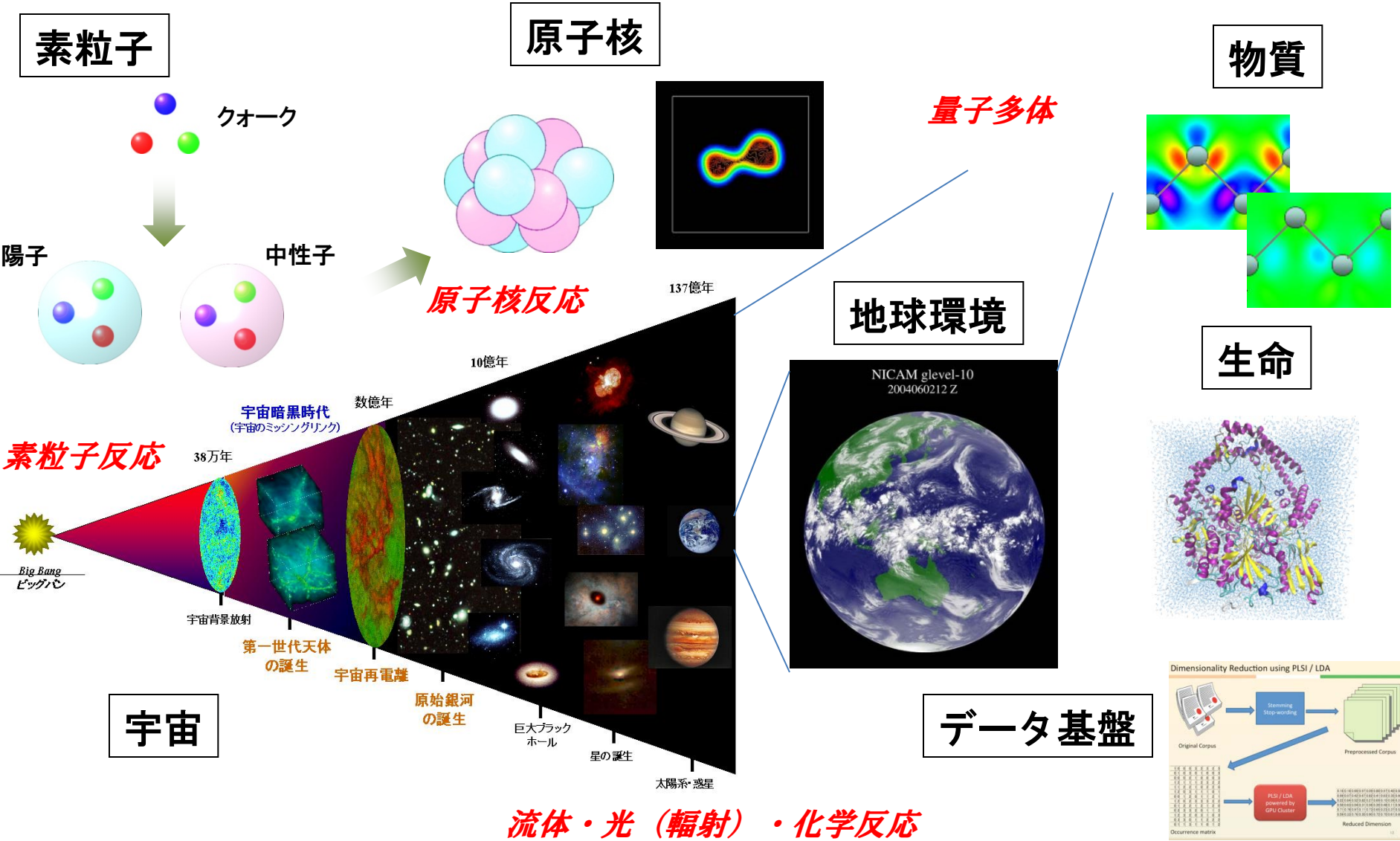
量子多体

生命

地球環境

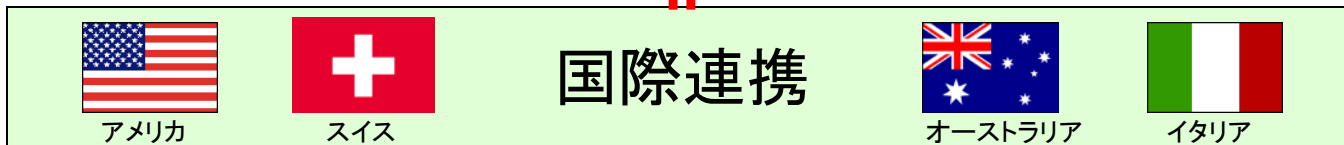
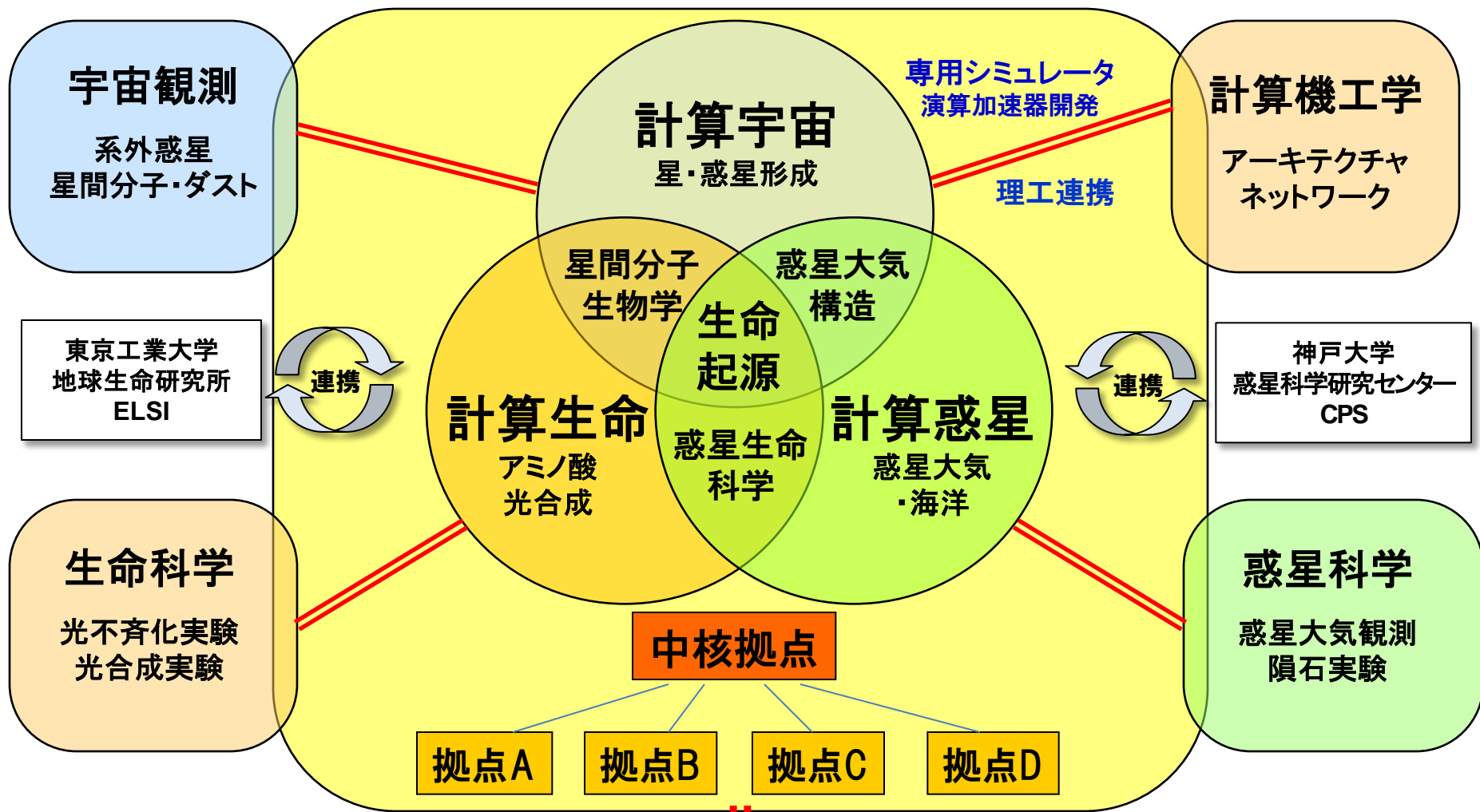
データ基盤

流体・光（輻射）・化学反応



宇宙生命計算科学連携拠点

— 宇宙, 生命, 惑星計算科学連携による宇宙における生命起源の探究 —



「宇宙生命計算科学連携拠点」参加協力者

22研究機関, 52名

						(赤字は分野世話人)
分野	氏名	職名	所属	専門分野	email	
天文・宇宙分野	梅村 雅之	教授	筑波大学 計算科学研究センター	計算宇宙物理	umemura@ccs.tsukuba.ac.jp	
	牧野 淳一郎	教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 理学研究流動機構	計算宇宙物理/計算機工学	makino@mail.jmlab.jp	
	松元 亮治	教授	千葉大学大学院 理学研究科	宇宙物理学	matumoto@astro.s.chiba-u.ac.jp	
	富阪 幸治	教授	国立天文台 理論研究部	シミュレーション天文学	tomisaka@th.nao.ac.jp	
	小久保 英一郎	教授	国立天文台 理論研究部	惑星系形成	kokubo@th.nao.ac.jp	
	森 正夫	准教授	筑波大学 数理物質系/計算科学研究センター	計算宇宙物理	mmori@ccs.tsukuba.ac.jp	
	中本 泰史	准教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 地球惑星科学専攻	天文学・惑星科学	nakamoto@geo.titech.ac.jp	
	松本 倫明	教授	法政大学 人間環境学部	天体物理学	matsu@hosei.ac.jp	
	町田 正博	准教授	九州大学大学院 理学研究院 地球惑星科学部門	星・惑星形成	machida.masahiro.018@m.kyushu-u.ac.jp	
	相川 祐理	准教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	星・惑星系形成	aikawa@kobe-u.ac.jp	
	生命・物質分野	白石 賢二	教授	名古屋大学大学院 工学研究科 計算理工学専攻	計算物質・生命	shiraishi@cse.nagoya-u.ac.jp
		矢花 一浩	教授	筑波大学 数理物質系/計算科学研究センター	計算物質	yabana@nucl.ph.tsukuba.ac.jp
岡田 晋		准教授	筑波大学 数理物質系/計算科学研究センター	計算物質	sokada@comas.frsc.tsukuba.ac.jp	
庄司 光男		助教	筑波大学 数理物質系/計算科学研究センター	計算生命	mshoji@ccs.tsukuba.ac.jp	
神谷 克政		助教	筑波大学 数理物質系 物理学域	計算物質	kkamiya@comas.frsc.tsukuba.ac.jp	
栢沼 愛		助教	筑波大学 計算科学研究センター	計算生命	kayanuma.megumi.fw@u.tsukuba.ac.jp	
梅田 宏明		研究員	筑波大学 計算科学研究センター	計算物質	umeda@ccs.tsukuba.ac.jp	
中野 雅由		教授	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	mnaka@cheng.es.osaka-u.ac.jp	
重田 青照		准教授	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	shigeta@cheng.es.osaka-u.ac.jp	
岸 亮平		助教	大阪大学 基礎工学部	計算物質・生命	rkishi@cheng.es.osaka-u.ac.jp	
小林 憲正		教授	横浜国立大学大学院 工学研究院	宇宙生命科学	kkensei@ynu.ac.jp	
高須 昌子		教授	東京薬科大学 生命科学部	生命科学	takasu@toyaku.ac.jp	
宮川 毅		助教	東京薬科大学 生命科学部	生物物理	takeshi@toyaku.ac.jp	
平田 聡		教授	イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校化学科	理論化学	sohirata@illinois.edu	
Boero Mauro		教授	IPCMS - Departement de Chimie et des Materiaux Inorganiques (DCMI)	計算物質・生命	mauro.boero@ipcms.unistra.fr	
高橋 淳一		特任研究員	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	生命科学・放射光化学	jitaka@ba2.so-net.ne.jp	
篠島 弘幸		教授	久留米高専 一般科目(理科系)	光エレクトロニクス・計算物理	shinujima@kurume-nct.ac.jp	
中川 和道		教授	神戸大学大学院 人間発達環境学研究所	放射光物性	nakagawa@kobe-u.ac.jp	
田中 真人	主任研究員	産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門	量子ビーム	masahito-tanaka@aist.go.jp		
篠島 弘幸	教授	久留米高等工業専門学校一般科目	計算生命	shinujima@kurume-nct.ac.jp		
柴田 裕実	特任研究員	大阪大学 産業科学研究所附属ナノテクノロジーセンター	物質科学	shibadanuki@mac.com		
惑星科学分野	井田 茂	教授	東京工業大学大学院 理工学研究科 地球惑星科学専攻	惑星物理学	ida@geo.titech.ac.jp	
	中川 義次	教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	惑星形成論	yoshi@kobe-u.ac.jp	
	林 祥介	教授	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	shosuke@gfd-dennou.org	
	高橋 芳幸	助教	神戸大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	yot@people.kobe-u.ac.jp	
	田中 博	教授	筑波大学 生命環境系/計算科学研究センター	地球環境	tanaka@ccs.tsukuba.ac.jp	
	生駒 大洋	准教授	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	惑星科学	ikoma@eps.s.u-tokyo.ac.jp	
	阿部 豊	准教授	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	ayutaka@eps.s.u-tokyo.ac.jp	
	河原 創	助教	東京大学大学院 理学系研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星科学	kawahara@eps.s.u-tokyo.ac.jp	
	倉本 圭	教授	北海道大学大学院 理学研究院 宇宙理学専攻	惑星科学・惑星大気	keikei@ep.sci.hokudai.ac.jp	
	石渡 正樹	准教授	北海道大学大学院 理学研究院 宇宙理学専攻	気候力学・惑星流体力学	momoko@ep.sci.hokudai.ac.jp	
	小高 正嗣	助教	北海道大学大学院 理学研究院 宇宙理学専攻	惑星気象学	odakker@ep.sci.hokudai.ac.jp	
	石原 卓	准教授	名古屋大学大学院 工学研究科 附属計算科学連携教育研究センター	流体力学(乱流)	ishihara@cse.nagoya-u.ac.jp	
	竹広 真一	准教授	京都大学 数理解析研究所	惑星物理学	takepiro@gfd-dennou.org	
	石岡圭一	准教授	京都大学 理学研究科 地球惑星科学専攻	地球惑星	ishioka@gfd-dennou.org	
	中島健介	助教	九州大学 理学部 地球惑星科学専攻	地球惑星	kensuke@geo.kyushu-u.ac.jp	
	西沢誠也	研究員	理化学研究所 計算科学研究機構	地球惑星	seiya@gfd-dennou.org	
	計算機工学分野	佐藤 三久	教授	筑波大学 システム情報系/計算科学研究センター	計算機工学	msato@cs.tsukuba.ac.jp
		朴 泰祐	教授	筑波大学 システム情報系/計算科学研究センター	計算機工学	taisuke@cs.tsukuba.ac.jp
児玉 祐悦		教授	筑波大学 システム情報系/計算科学研究センター	計算機工学	kodama@cs.tsukuba.ac.jp	
高橋 大介		教授	筑波大学 システム情報系/計算科学研究センター	計算機工学	daisuke@cs.tsukuba.ac.jp	
塙 敏博		准教授	筑波大学 システム情報系/計算科学研究センター	計算機工学	hanawa@ccs.tsukuba.ac.jp	
中里直人		准教授	会津大学 コンピュータ理工学部	計算天文学/HPC	nakasato@u-aizu.ac.jp	

計算宇宙生命の課題

惑星形成

ダスト形成: 相転移, サイズ

ダスト沈殿: ガス(乱流) + ダスト

微惑星形成: 集積, 落下問題

原始惑星形成: スリングショット, マイグレーション

惑星大気・海洋

大気構造

大気循環

大気化学

海洋形成

熱物質収支

生命

アミノ酸ホモキラリティ(円偏光波による不斉化)

惑星分子化学

バイオマーカー(光合成, レッドエッジ)

星間分子化学

手法

N体

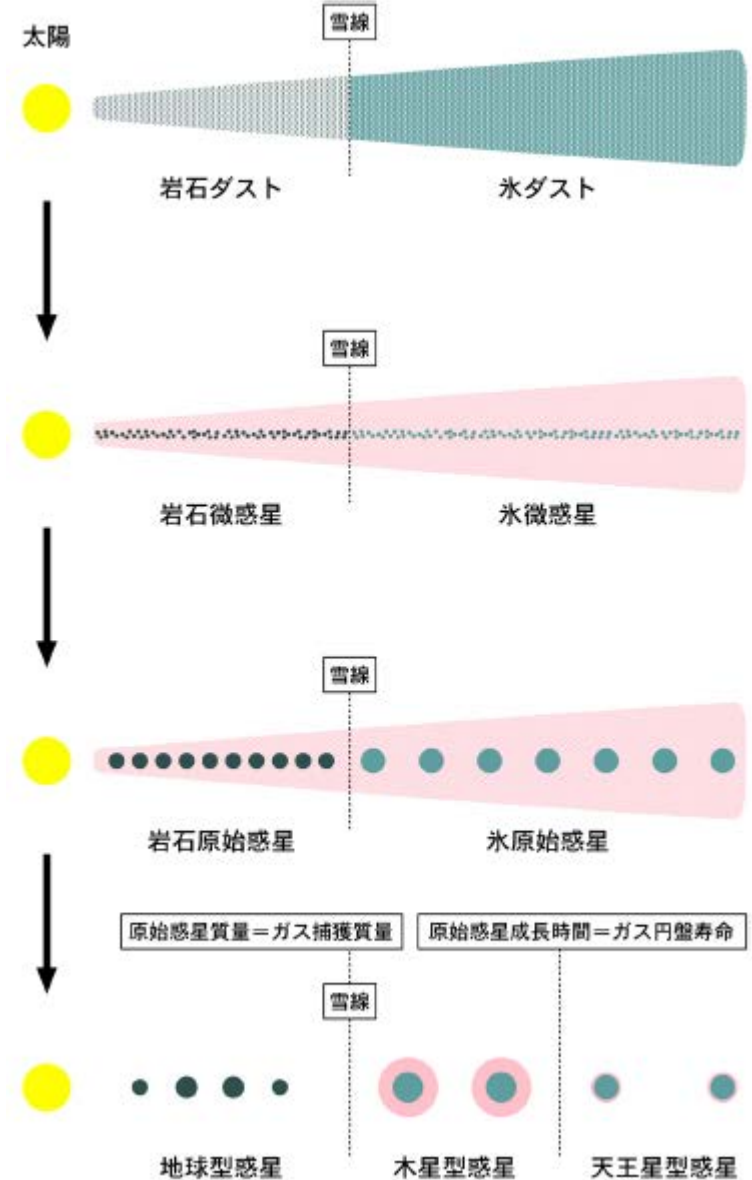
流体(対流, 乱流), 磁気流体, 輻射流体

輻射輸送

量子力学計算(DFT)

共同研究

マッチアップ: 部会



(理科年表, 小久保)

宇宙生命計算科学

宇宙物理



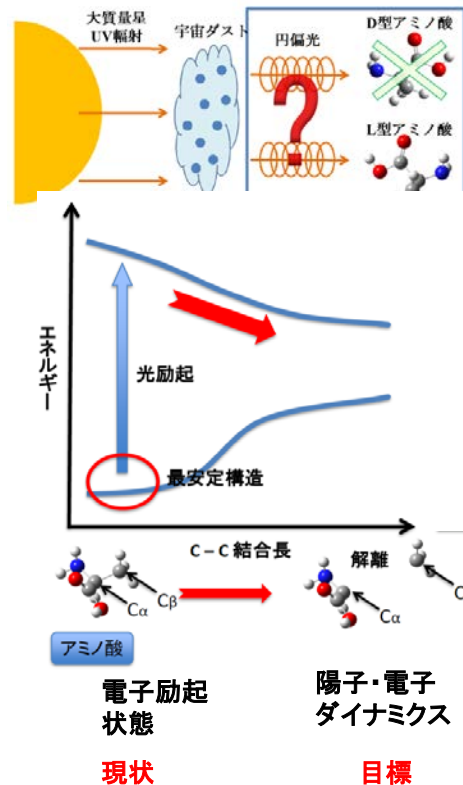
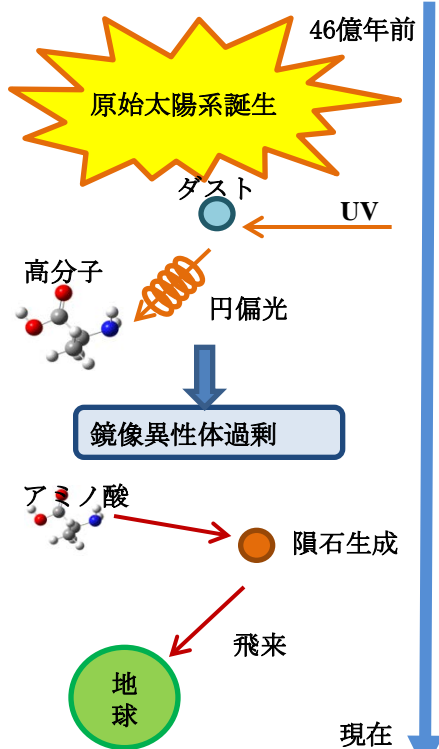
生命物理

宇宙分野, 生命分野の連携

背景と特色: 星間生命材料分子の観測, 系外惑星観測, アストロバイオロジーの取り組みにより, 宇宙における生命起源探究の機運は急速に高まってきている。計算科学の宇宙分野と生命分野が密に連携して, 第一原理計算により宇宙生命起源を探究する。

探究課題1: 星間アミノ酸の円偏光波による不斉化

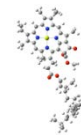
現状: 円偏光波によるアミノ酸の電子励起状態の量子力学計算 (0.1PFlops)
 目標: 円偏光波によるアミノ酸・アミノ酸前駆体の陽子・電子量子ダイナミクス計算 (10PFlops)



探究課題2: 系外惑星における光合成とバイオマーカー

現状: 電気双極子近似による光合成アンテナ機構の量子計算 (0.1PFlops)
 目標: クロロフィル・ダイナミクスを入れた光合成アンテナ機構のQM/MM計算 (10PFlops)

クロロフィルTDDFT計算

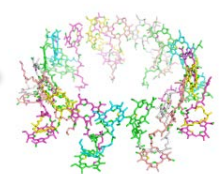


現状



電気双極子近似

目標



クロロフィル・ダイナミクス QM/MM計算

Current Potential Habitable Exoplanets

Compared with Earth and Mars and Ranked in Order of Similarity to Earth

#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7
0.92	0.85	0.81	0.79	0.77	0.72	0.72
Gliese 581 g*	Gliese 667C c	Kepler-22 b	HD 40307 g*	HD 85512 b	Gliese 163 c	Gliese 581 d
Sep 2010	Nov 2011	Dec 2011	Nov 2012	Sep 2011	Sep 2012	Apr 2007

*planet candidates

CREDIT: PHL @ UPR Arcibo (phl.upr.edu) Nov 19, 2012

系外ハビタブルプラネット候補

作業部会

アミノ酸キラリティ部会

第1回会合 2013年8月8日 筑波大学

神戸大 中川

阪大 高橋

AIST 田中

久留米高専 篠島

名大 白石, 洗平

筑波大 梅村, 庄司, 神谷, 矢花, 栢沼, 佐藤, 木立

宇宙乱流部会

第1回会合 2013年8月12日 名古屋大学

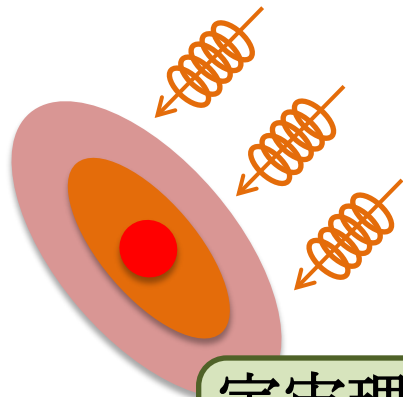
名大 白石, 石原, 芳松, 岡本, 洗平

東工大 中本

筑波大 梅村, 吉田

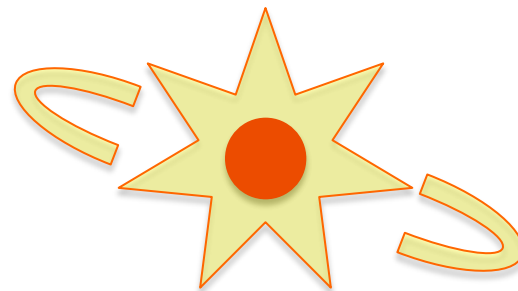
アミノ酸キラリティ部会

初期太陽系輻射場

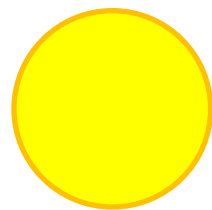


宇宙理論

超新星爆発による
元素合成



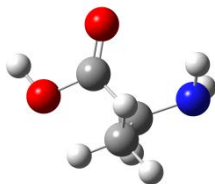
原子核理論



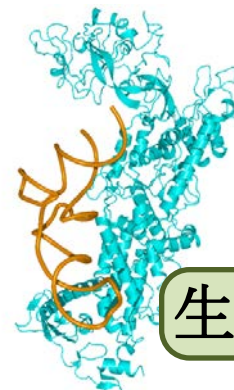
原始惑星系

生体高分子機能

L型アミノ酸過剰



物性物理



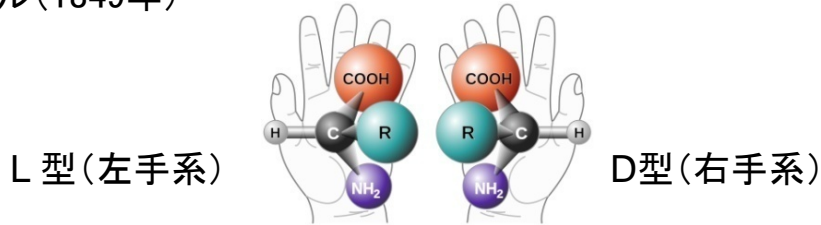
生命物理

生体L型アミノ酸

ーパスツール以来150年の謎ー

有機化合物の鏡像非対称性(カイラリティ/キラリティ)

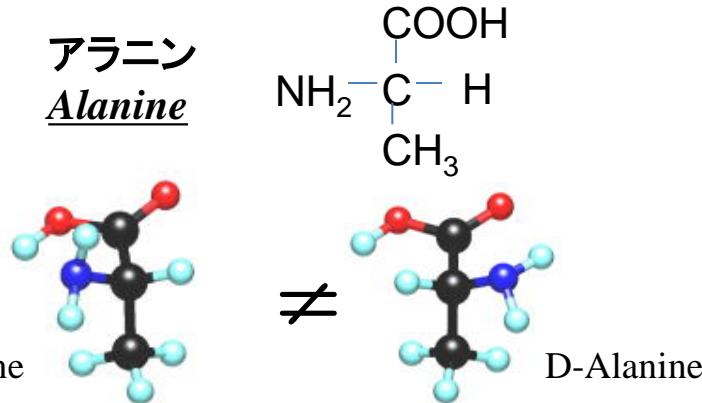
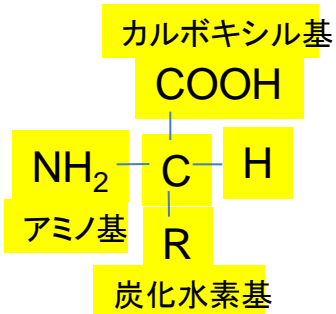
パスツール(1849年)



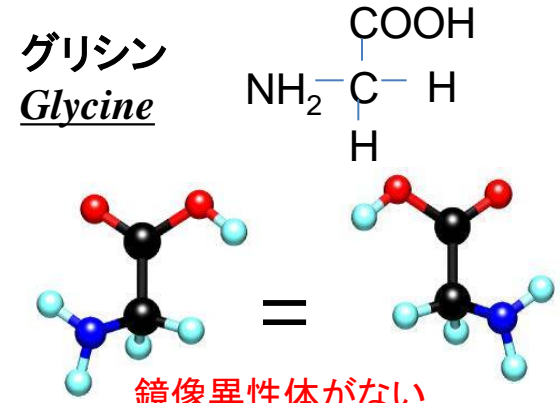
ルイ・パスツール(1822-1895)

α-アミノ酸

アミノ基NH₂, カルボキシル基COOH, 水素H, 炭化水素基R(H, CH₃, ...)が, 炭素Cを不斉中心として4面体構造を形成。官能基が不斉炭素の周りに反時計回りに配置しているものがL-体, 時計回りに配置しているものがD-体。



鏡像異性体(enantiomer)がある
(カイラルである)



鏡像異性体がない
(カイラルではない)

生体アミノ酸鏡像異性体過剰(ホモ・カイラリティ)

実験室では、L型(左手系)とD型(右手系)は同数できるが、生体のアミノ酸は、基本的にL型だけが構成成分となっている。D型は天然では細菌の細胞壁の構成成分や老化組織、ある種の神経細胞などに存在が見出されているのみ。(歯のエナメル質・目の水晶体・脳のタンパク質中のL型アミノ酸が老化と共にD型アミノ酸にラセミ化される。)

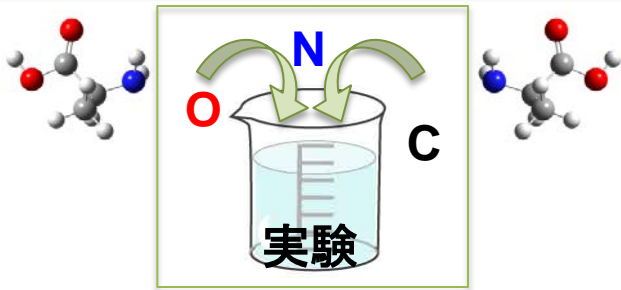
実験室で生成されるアミノ酸

左手型

50%

右手型

50%



生体内アミノ酸

左手型

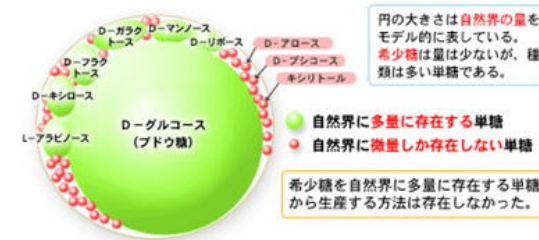
over 99%

右手型



糖はD型

99%Lアミノ酸



【参考1】グルタミン酸ナトリウム

L型は旨味成分となるが、D型は無味。(グルタミン酸受容体にL型が結合。)

【参考2】サリドマイド事件

睡眠・鎮静剤サリドマイドを妊婦が服用することによって、胎児に奇形を生じた薬害事件。サリドマイドはR体(L体)とS体(D体)が等量混ざったラセミ体として合成される。R体は無害であるがS体は高い頻度で胎児に異常を引き起こす。

【参考3】野依法

不斉触媒「BINAP」により、99%L型の抗生物質やモルヒネを生成可能にした。

隕石中のアミノ酸

マーチソン隕石

1969年9月28日、オーストラリア・ビクトリア州のマーチソン村に飛来。

45億年以上前の隕石

Engel & Macko, Nature 1997, 389, 265

Pizzarello & Cronin, 2000, Geochimica et Cosmochimica Acta, 64, 329

隕石中にグリシン, アラニン, グルタミン酸といったタンパク質を構成するアミノ酸を発見。発見されたアミノ酸にはL型鏡像体過剰(数%)が見られる(地上アミノ酸の混合を疑念視)。1997年, L型鏡像体過剰が見られるアミノ酸の窒素¹⁵Nの同位体比が地球上のものと大きく違うことが示され, 鏡像体過剰が地球外で生成された物であることが証明された。糖やアルコール化合物も発見されている。

Daniel Glavin & Jason Dworkin, PNAS, 2009

L-イソバリンの18%過剰

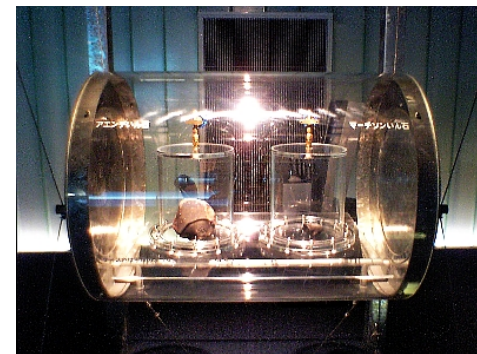
高温隕石中のアミノ酸発見

(2010. 12. 21, ナショナルジオグラフィック)

2008年, スーダン北部ヌビア砂漠に落下, 温度1400K

約1500万年前に他の天体と衝突し, 地球に接近し2008年に地球の大気圏に突入した直径約4メートル, 重さ約59トンの小惑星の破片。(地球の大気圏に突入する前に発見された史上初の天体。)

⇒ 非常に高温の小惑星が冷える過程で生じる気体の反応でもアミノ酸が生成される可能性。



生命の海科学館
(愛知県蒲郡市)



ヌビア砂漠の隕石

実験

光不斉化実験

Meierhenrich et al. 2010, Angew. Chem. Int. Ed, 49, 7799

- ・ α -メチルおよび α -水素アミノ酸のいずれにおいても、左右円偏光照射により対称な光学異方性が観測され、不斉構造が発現したと考えられる。
- ・左右円偏光の吸収差による単純な不斉分解だけではなく、分子のconformation変化などの構造変化が誘起された可能性が示唆される。

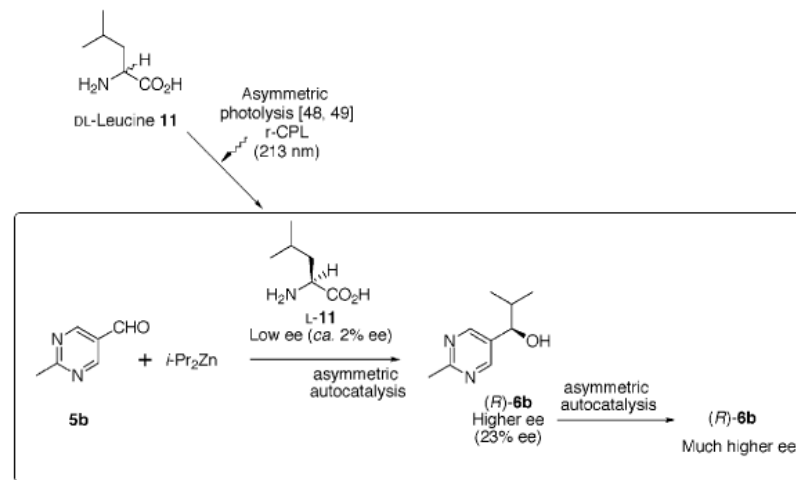
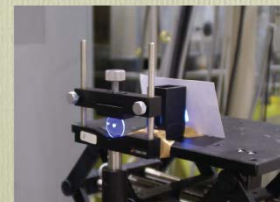
不斉自己増殖反応

特別推進(H15~H19)「不斉自己増殖反応の開拓および超高感度不斉認識・不斉の起源解明への応用」(代表 碓合 憲三, 東京理科大学理学部・教授)

ラセミ体のロイシンに対し右円偏光照射により約2% ee鏡像体過剰率(enantiomeric excess, ee)のL-ロイシンが得られる。約2% eeのL-ロイシンを不斉開始剤としてピリミジン-5-カルバルデヒド5bとジイソプロピル亜鉛の反応を行った。その結果23% eeの(R)-5-ピリミジルアルコール6bが得られることが明らかになった。さらに不斉自己増殖反応により容易に鏡像体過剰率を上げることができる。これにより、円偏光のみを不斉源として、きわめて高い鏡像体過剰率のキラル有機化合物が生成可能であることを示した。

アミノ酸薄膜への円偏光照射実験
(高橋 淳一 NTT先端総研, 他)

Light Source:
UVSOR-II (Oakazaki, Japan)
Free Electron Laser (FEL)
Circularly Polarized Light (CPL)
Polarization Purity > 98%
Wavelength $\lambda = 215 \sim 6 \text{ nm}$
Total Dose $\sim 10^{16} \text{ eV}$ (2~10 mWhour)



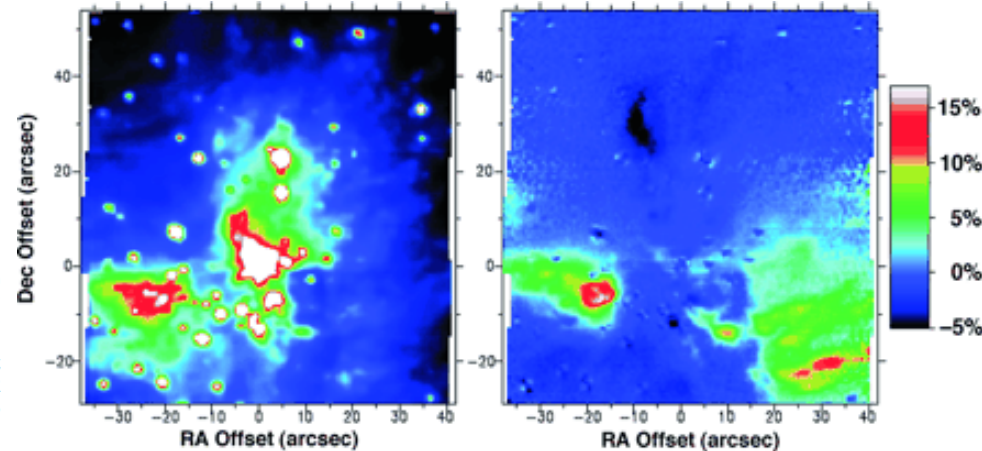
オリオン星雲における左回り円偏光の発見

Bailey et al., 1998, Science, 281, 672

3.9-m Anglo-Australian Telescope

赤外線観測により、オリオン星雲の星形成領域で、強い円偏光成分を発見

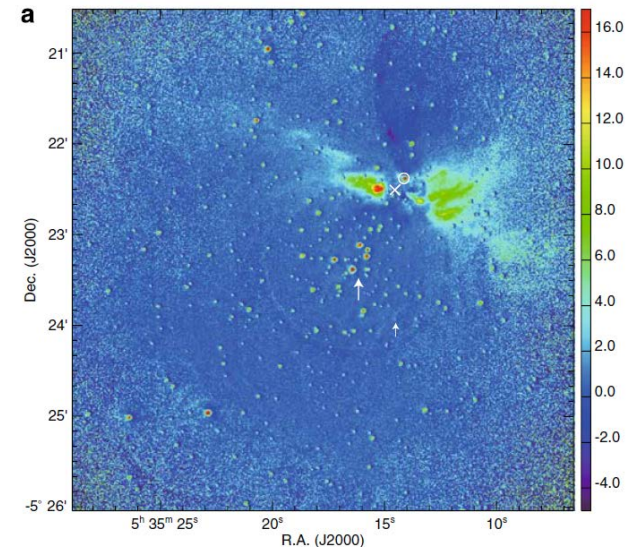
Fig. 1. Circular polarization image of the OMC-1 star-formation region in Orion at 2.2 μm (K_n band). (Right) Percentage circular polarization ranging from -5% (black) to +17% (white). Polarization accuracy ranges from about 0.1% in the brighter regions to 1% in the fainter regions. By convention, positive polarization means that the electric vector is seen to rotate counterclockwise in a fixed plane by an observer looking at the source. (Left) The total IR intensity. The bright source at coordinates (0, 0) is the Becklin-Neugebauer object. The size of a typical protostellar disk (~ 100 astronomical units) is less than 1 arc sec at the 450 pc distance of OMC-1 and therefore much smaller than the observed polarization structure.



Fukue et al. 2010, Orig Life Evol Biosph, 40, 335

- オリオン星雲の広領域 ($\sim 6' \times 6'$), 円偏光近赤外観測 (K_s band: 2.14 μm)
- 南アフリカ天文台 1.4-m IRSF
- 大質量星形成領域 (BN/KL nebula) に, 広がった円偏光波 (~ 0.4 pc) を発見。
- 小質量星の周りでは円偏光, 直線偏光共に受からなかった

Fig. 1 Image of degree of polarization (%) in the K_s band (2.14 μm) of the central region of the Orion star-forming region. a Image of circular polarization degree; b The degree of linear polarization. The field-of-view is 5.5 arcminutes or 0.74 pc square at a distance of 460 pc. North is up and east is to the left. The positions of IRC2 and BN are indicated by a cross and a circle, respectively, while those of the Trapezium stars and the low-mass young star OMC-1S are denoted by big and small arrows, respectively. A positive sign for CP indicates that the electric vector is rotated anticlockwise in a fixed plane relative to the observer



ダスト散乱による円偏光 (CP) 波の生成

▶ Small particle limit ($x=2\pi r/\lambda < 1$) Gledhill&McCall, 2000, MNRAS, 314, 123

- ・無偏光波が球形ダストで散乱されたときは直線偏光波のみ生成
- ・直線偏光波が球形ダストで散乱されたときはCPを生成
- ・無偏光波が楕円体ダストで散乱されたときはCPを生成
 - oblate spheroid は prolate よりCPの生成率が高い (dustの整列も効く)
 - 最大でCP=50%

▶ Mie scattering case ($x=2\pi r/\lambda > 1$) Bailey et al. 1998, nature, 281, 672

IRからUV領域まで計算 (Fig. 2)

UV光に対して CP=21-24% for oblate, CP=14% for prolate

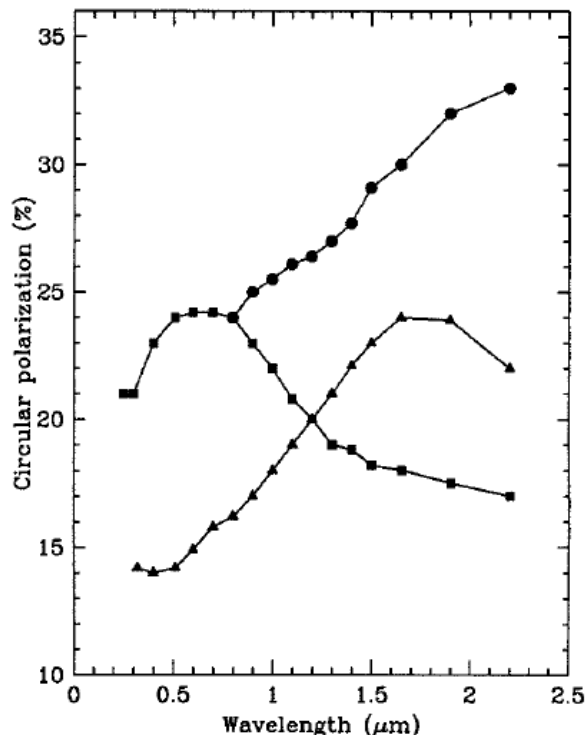


Fig. 2. Circular polarization caused by Mie scattering of unpolarized light from a size distribution of aligned spheroidal grains from 0.005 to 0.25 μm with a power law index of -3.5 . The circular polarizations at a scattering angle of 90° are plotted for spheroidal grains of a dirty-ice type of material (refractive index $1.5 - 0.4i$) with different axis ratios ($r = a/b$, where $r < 1$ for oblate spheroids, $r > 1$ for prolate spheroids). (\blacksquare) $r = 2.0$, (\blacktriangle) $r = 0.5$, (\bullet) $r = 0.33$. The calculations were carried out with the use of code adapted from that of Barber and Hill (28). Owing to numerical difficulties with the code it was not possible to explore large axis ratios in the UV, although these are the instances that produce the largest polarizations. However, the models calculated at small axis ratios show that UV polarization is comparable to that in the IR, and IR polarizations are comparable to or greater than that seen in OMC-1.

星間空間におけるアミノ酸 キラリティ生成機構の理論的研究

佐藤 皓允^{1,*}, 庄司 光男^{1,2}, 神谷 克政^{1,2},
梅村 雅之^{1,2}, 矢花 一浩^{1,2}, 白石 賢二^{1,2}

¹筑波大学 数理物質科学研究科

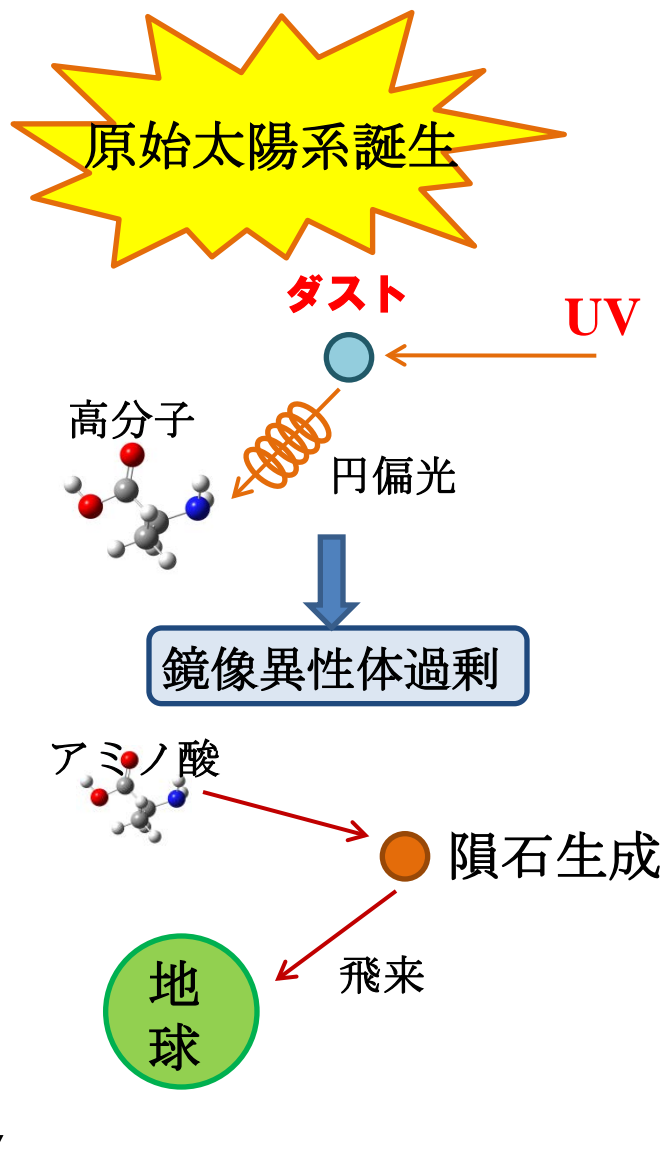
²筑波大学 計算科学センター

初期太陽系におけるL型アミノ酸過剰生成シナリオ

from the original by

佐藤

46億年前



現在

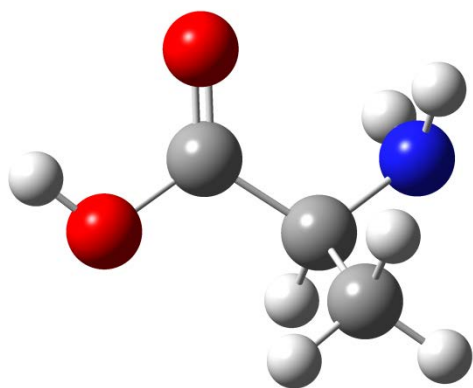
- ① 原始太陽系誕生
- ② 近傍の大質量星からの紫外線がダスト散乱され円偏光を生成
- ③ 円偏光がアミノ酸に照射され鏡像異性体過剰を引き起こす
- ④ アミノ酸を含んだ隕石の生成
- ⑤ これら隕石が原始地球に降り注ぎ、現在の生体分子の起源となった。

計算に用いたアミノ酸の種類

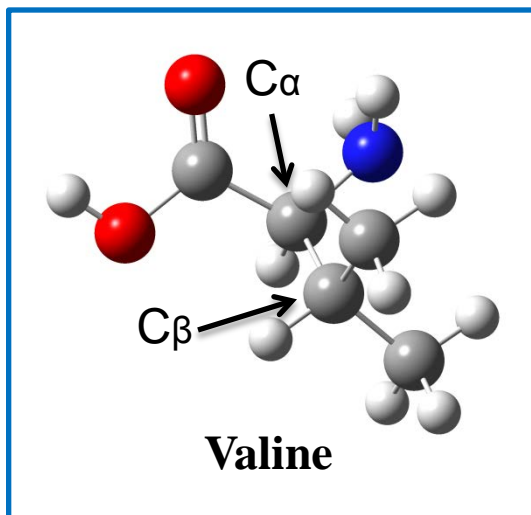
	分子量 [g/mol]	Murchison隕石中 [nmol/g]	生命	不斉炭素数
Alanine	89.09	10.4	○	1
Valine	117.15	8.0	○	1
Isovaline	117.15		×	1

[M. H. Engel et. al., *Nature* **389**, 265 (1997)]

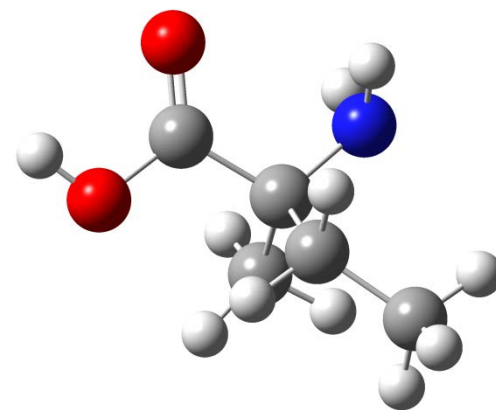
星間空間におけるアミノ酸の安定構造



Alanine



Valine



Isovaline

計算手法

計算Software	: Gaussian09
手法	: Time-dependent Density Functional Theory (TDDFT)
汎関数	: Becke-3-Lee-Yang-Parr (B3LYP)
基底関数	: 6-31+G*

求めた物理量

- 振動子強度 (吸収強度)
- 円偏光二色性 (CD)
- 励起ポテンシャルエネルギー

振動子強度

振動子強度 (遷移強度) とは、電子遷移の起こりやすさを表す無次元量の指標。

物理的には、励起状態の混じりの程度を表す。

$$f_{(g \rightarrow n)} = \frac{2}{m\hbar\omega_{(g \rightarrow n)}} [\langle \Psi_g | \mu_{ele} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \mu_{ele} | \Psi_g \rangle]$$

$$\mu_{ele} = -\sum_i r_i + \sum_M Z_M R_M$$

$$\mu_{mag} = -\frac{1}{2} \sum_i r_i \times p_i + \sum_M \left(\frac{Z_M}{2M_M} \right) R_M \times P_M$$

$$\omega_{(g \rightarrow n)} = \omega_g - \omega_n$$

r_i, p_i : 電子 i の座標、運動量

Z_M, M_M, R_M, P_M : 原子核 M の電荷、質量、座標、運動量

m, ω : 電子の質量、振動数

これらの項は
ボルン・オッペンハイマー近似
により無視

円偏光二色性 (CD)

円偏光二色性とは、構造による左円偏光と右円偏光の吸収強度に差を表す指標。

CDは分子の立体構造だけでなく、吸収する光の波長にも依存する。

$$R_{(g \rightarrow n)} = \text{Im}[\langle \Psi_g | \mu_{ele} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \mu_{mag} | \Psi_g \rangle]$$

円偏光二色性は理論的に以下のように表される。

$$\Delta A = (\Delta \epsilon) c l$$

$$\Delta \epsilon = \epsilon_{left} - \epsilon_{right}$$

ϵ : モル吸収係数 [cm²/mol]

c : モル数 [mol/l]

l : 厚み [cm]

L型, D型の関係

$$\Delta \epsilon(L) = -\Delta \epsilon(D)$$

宇宙乱流部会

名大：白石, 石原, 芳松, 岡本, 洗平
 東工大：中本
 筑波大：梅村, 吉田

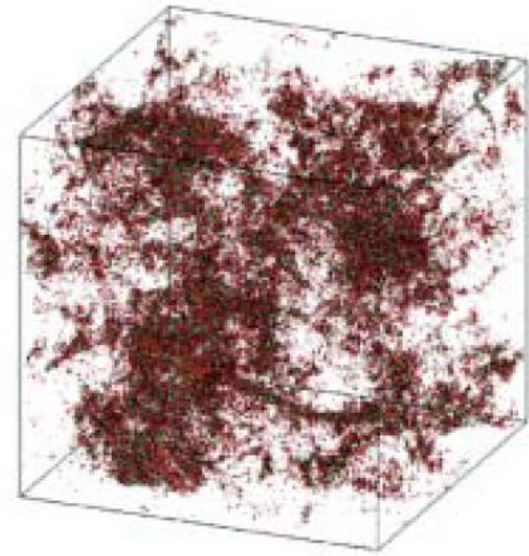
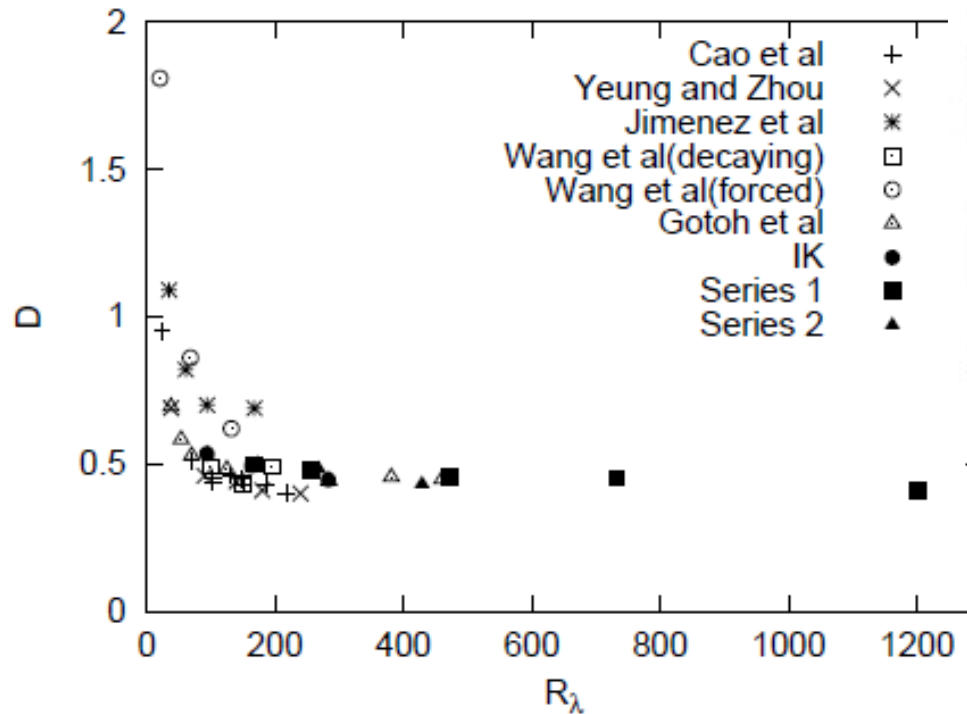
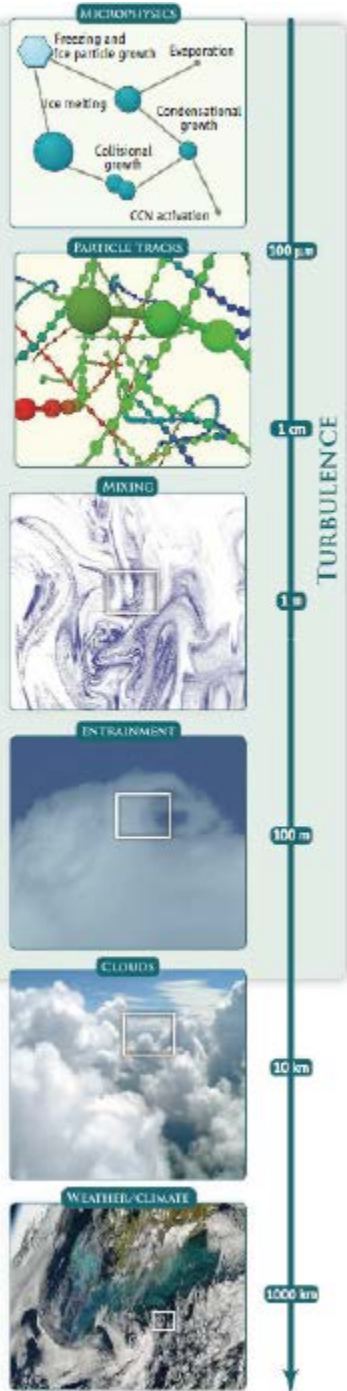


図 1 規格化された平均エネルギー散逸率 D の R_λ への依存性. 文献 [4] から.

4) Kaneda, Y., Ishihara, T., Yokokawa, M., Itakura, K. & Uno, A.: Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box, *Phys. Fluids*, **15**, (2003) L21–24.

宇宙乱流部会

アクションアイテム

(1) $512 \times 512 \times 512$ の計算で非圧縮計算の先行研究を再現し、 η 等によくわからないパラメータの再考を行う。

磁場なし & 磁場入り

(2) $2048 \times 2048 \times 2048$ 等よりも精度の高い計算を行い、コロモゴロフ長が典型的な長さである等を再確認する。

磁場なし & 磁場入り

(3) z 方向に有効ポテンシャルを導入し、宇宙ダストの沈殿も合わせたシミュレーションにもっていく。

宇宙生命計算科学連携拠点

—宇宙, 生命, 惑星計算科学連携による宇宙における生命起源の探究—

目的: 計算機工学分野との連携の下, 専用シミュレータを開発し, 宇宙における生命の起源に関わるキープロセスを宇宙・生命・惑星科学の協働によって第一原理計算により探究し, 宇宙生命科学のブレークスルーを創出する。

背景と特色: 星間分子観測, 系外惑星観測, アストロバイオロジーの取り組みにより, 宇宙における生命起源探究の機運は急速に高まってきている。本拠点は, **計算科学のアプローチ**の下で, 宇宙分野と生命分野の協働なくしては探究できない融合領域を創出するものである。

計画の必要性: 宇宙分野と生命分野が密に連携して, 計算科学により宇宙生命起源を探究する拠点はまだない。本計画は, 中核拠点と複数の大学や研究所にまたがる拠点を形成するものであり, 1大学に閉じる計画ではない。

組織: 中核拠点を置き, 大学, 研究所と共に共同研究推進体制をオーガナイズする。

探究課題:

惑星形成(ダスト形成, ダスト沈殿, 微惑星形成, 原始惑星形成)

惑星大気・海洋(大気構造, 大気循環, 大気化学, 海洋形成, 熱物質収支)

生命(惑星分子化学, バイオマーカー, 星間分子化学, アミノ酸ホモキラリテイ)

活動状況1

「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ

日時：平成25年6月28日(金) 10:00-18:00, 6月29日(土) 10:00-17:00

場所：筑波大学 計算科学研究センター ワークショップ室

- ・「宇宙生命計算科学連携拠点」について 梅村 雅之 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・地球型惑星形成 小久保 英一郎 (国立天文台 理論研究部)
- ・ハビタブル惑星の存在確率の理論的推定 井田 茂 (東京工業大学 地球生命研究所)
- ・偏極量子ビームによる生体有機物キラリティ発現実験 & アミノ酸とその前駆分子の円二色性スペクトル第一原理計算
高橋 淳一 (日本電信電話(株) 先端技術総合研究所)
- ・ペプチドの構造の分子動力学シミュレーションによる研究 高須 昌子 (東京薬科大学 生命科学部)
- ・地球流体電脳倶楽部-知見情報集積とシミュレーションモデル開発の試み- 林 祥介 (神戸大学 理学研究科)
- ・同期回転惑星の気候学 石渡 正樹 (北海道大学大学院 理学研究院)
- ・演算加速装置と通信機構の融合によるHPCの新展開 朴 泰祐 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・星周円盤の重力不安定による惑星形成 町田 正博 (九州大学 大学院理学研究院)
- ・原始惑星系円盤を探る輻射輸送計算 中本 泰史 (東京工業大学 地球惑星科学)
- ・初期太陽系におけるL型アミノ酸過剰の起源の第一原理計算による研究 白石 賢二 (名古屋大学大学院)
- ・分子軌道計算プログラムOpenFMOのGPGPU化 梅田 宏明 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・銀河形成・進化の理論研究 森 正夫 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・円盤ダイナモの3次元シミュレーション 松元 亮治 (千葉大学大学院 理学研究科)
- ・Hras-GTP 複合体における GTP 加水分解の MD シミュレーションによる研究 宮川 毅 (東京薬科大学 生命科学部)
- ・星間および惑星大気中での高分子有機物の生成と生命の起源 小林 憲正 (横浜国立大学大学院 工学研究院)
- ・シンクロトロン放射を用いたアミノ酸の円二色性測定 中川 和道 (神戸大学 人間発達環境学研究科)
- ・第一原理計算に基づく反応解析 重田 育照 (大阪大学大学院 基礎工学研究科)
- ・計算科学に基づくナノ・バイオ物質の機能・構造・電子状態の研究 神谷 克政 (筑波大学 数理物質系 物理学域)
- ・L型アミノ酸生成機構とバイオマーカーのための光合成光吸収機構についての理論的研究 庄司光男 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・量子化学計算による金属錯体の触媒機構の解明 栢沼 愛 (筑波大学 システム情報系 情報工学域)
- ・星惑星系形成での星間化学計算 相川 祐理 (神戸大学 理学部)
- ・惑星大気大循環モデルを用いた数値シミュレーション 高橋 芳幸 (神戸大 惑星科学研究センター)
- ・高レイノルズ数乱流の渦構造について 石原 卓 (名古屋大学大学院 工学研究科 附属計算科学連携教育研究センター)
- ・火星大気における傾圧不安定波の理論的研究 田中 博 (筑波大学 計算科学研究センター)
- ・回転球殻対流問題~天体内部流体運動の基礎問題として 竹広 真一 (京都大学 数理解析研究所)

活動状況2

- メールングリスト (CAB: Computational AstroBiology)
cab@ccs.tsukuba.ac.jp
- 情報交換用 wiki
<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/ccswiki/cabwiki/>
- 合同研究会「自然界における生体分子キラリティ起源—実験・観測・計算シナジーによるアプローチ」 2013年11月16日
- 「研究大学強化促進事業」
計算科学研究センタープロジェクト
教員公募
- 部会ミーティング
 - ① アミノ酸キラリティ
 - ② 宇宙乱流(ダスト集積)