1P161

Ecotiorhodospira halophila における光合成的水素発生機構の解明

○對比地 久義、山崎 洋一、片岡 幹雄（奈良先端大・物質創成科学）

太陽エネルギーと生物からクリーンなエネルギーとして扱える水素を生産する光合成的な水素発生は、現在、低効率のために実用には到っていない。この問題を解決するために、微量の水素発生が報告されている紅色硫黄細菌 *Ecotiorhodospira halophila* (E.halophila) の水素発生に関与するタンパク質をクローニングすることから分子レベルでの比較、再検討を考えている。水素発生に関与する酵素ニトロゲナーゼは dinitrogenase reductase (NifH) の 2 量体と dinitrogenase α (NifD)、 β (NifK) サブユニットの $\alpha 2 \beta 2$ 4 量体 (NifKD) からなる複合タンパク質であり、それぞれの遺伝子はクラスター (nif クラスター) を形成して存在する。しかし、E.halophila ではニトロゲナーゼのアミノ酸配列はおろか、その存在すら確認されていなかった。そこで、まず nifH、nifD をクローニングするために現在報告されている nifH、D において相同性の高い部位から縮重プライマーを作成し、PCR 法により部分断片を得た。この部分断片を相同性検索した結果、nifH に関しては nifH と非常に相同性のあるプロクロロフィリド還元酵素を構成するタンパク質 bchL となり nifH を得ることはできなかった。しかし、nifD の相同性検索を行った結果、*Azotobacter vinelandii* の nifD との相同性が 82 % となった。これより E.halophila はニトロゲナーゼを持つことが分かった。現在、クラスター全体の塩基配列を決定中である。

T.Hisayoshi : Analysis of photosynthetic hydrogen generation by *Ecotiorhodospira halophila*

1P163

分子オートマトンを用いた仮想的化学反応ネットワークの研究

○牛久保 智宏、笹井 理生（名大院・人間情報）

化学は関係性の科学とみなすことができる。例えば、分子は官能基の種類により相互作用のルールを決定する部品とみなすことが可能である。このような特徴を抽出した仮想的模型において、新たなシステムが創発することが知られている。例えば Fontana[1] は Lisp 言語を用いることにより、安定な反応ネットワークが生成しうることを示し、ホモポリマーの生成が可能であることを示した。

本研究では「生体分子」と同様に機能を持ちうる分子の生成の第一段階として、ヘテロポリマーの生成のためにシステムが必要とする条件を探ることを目的とする。そのために次のようなモデルを考えた。第一に分子はグラフとして考えるものとし、グラフにおける各ノードは「原子」もしくは「官能基」として考えるものとする。第二に反応はグラフ間の相互作用によって決定するものとする。この時、ノード数は保存するものとする。第三に次に挙げる 2 つの「エネルギー」を計算することによって、反応は決定される。

- 1、結合エネルギー
- 2、立体反発エネルギー

これらのエネルギー差が負の場合反応は受け入れられる。

結合エネルギーが立体反発エネルギーに比べ大きい場合、多くのノードからなるグラフが多くの種類生成した。一方、立体反発エネルギーが結合エネルギーに比べ小さい場合同じ形状を持つ小さなグラフが生成した。反応ネットワークを自動的に変化させることで、ヘテロポリマーを精製する条件の探索を現在行っている。

[1] Fontana, W., Algorithmic chemistry, in artificial life 2, Addison Wesley, 1990

T.Ushikubo, M.Sasai : Artificial chemical reaction network of molecular automata.

1P162

生命の主体性からみる生命の起原（3）—生命の起原におけるシステムの主体性の重要性について—

○川村 邦男（大阪府大院・工・応用化学）

生命の起原の問題に取り組んでいくと、起原と進化の問題を総合的にとらえたいという課題につきあたる。先の報告 (Workshop on Life, Modena, Italy, Sep. 3-8, 2000; 生命の起原および進化学会第 26 回学術講演会, 2001 年 3 月 (大阪)) で、生命の定義、進化における生物の主体性の重要性の再考、地球上における天然のシステムの分類、主体性から見る生命の起原、生物システムにおける情報と機能の対応付けと主体性との関係、主体性のより客観的な意味などについて議論・考察した。ここで私は、生命を「主体性を持つシステム」と定義した。また主体性について先行する研究や思想を遡っていったところ、主体性とは生物とそれを取り巻く環境との関係において意味づけられ、生物は進化に対しても主体的に関与していると考えた今西錦司の進化論に行きあたる。今西進化論に対しては批判もあるだろうが、一面の真理を含んでいると私は思う。一方、最近の in vitro selection 法などを利用した RNA ワールドの研究は、genotype と phenotype との対応付けの仕組みの存在が生命が出現した過程で重要であったことを示唆している。私はこの考え方を、生物システムのより高いレベルで認められる情報と機能との対応付けの仕組みへと拡張することによって、起原と進化とを 1 つの座標軸でとらえることができることを提案した。一方、生物の主体性は生命が出現した時点から連続と発展しており、もう 1 つの座標軸である。この関係を考察していくと、「主体性」および「情報と機能の対応付け」の進化における役割とは、これらが進化に対して寄与し得る 1 対のパラメータであると推定できる。すなわち主体性とは対応付けとの関係において定義され、生命の起原と進化において基本的な役割を果たしてきたものと想像される。

K. Kawamura : The origin of life from the life of subjectivity (3): Importance of the subjectivity of the system at the time of origin of life

1P164

人為淘汰下における断続平衡進化

○高地 康宏¹、郡司 幸夫² (¹神戸大学自然科学科、²神戸大学理学部)

我々は、これまで人為淘汰というべき特殊な進化形態をとっているサラブレッドの進化において、断続平衡的な振る舞いを見い出してきた。(Takachi&Gunji 投稿中) 繁殖を完全に人間が管理すれば、系統が急に大発生したり、逆に大量絶滅してしまうようなことは、起こりにくはずである。本研究では、こうした静穏期から激変期にかけて、具体的にどういったことが起こっているのかという問題に取り組んだ。まずモデルを構築する上で、サラブレッドを生産する人間の存在、思惑といったものを系に積極的に取り入れた。生産者たちは、基本的に、速く優れた競走馬を生産するための指針となるドサージュ値を手掛かりに交配を決定しながらも、同時にその「カン」や思い入れの部分も決して無視しているわけではない。ここでは、モデル化において決して都合の良いとは言えない要因を切り捨てることなく、また切り捨てないことで一般性が保たれるということを主張するわけでもない立場—あえて言うならば、現実とモデルとのギャップをどう捉えるかということまで立ち入り、モデル化を行っている。我々は、概念束という数学的手法を用いることによって、生産者が競走馬を生産する上で自分の「カン」も含め、どれだけその系統の歴史を踏まえたか、どれだけ今まで受け継がれてきた系統の「伝統」に則ったかという程度を数値化することに成功した。また一方で、種馬の繁殖能力のポテンシャルを数値化し、両者の関係を調べたところ 2 つの間に比例関係がみられた。つまり、より歴史を踏まえて生産を行うほど、その種馬としての繁殖能力が高くなり、絶滅を起こしにくい結果が得られたのである。

Y.Takachi and Y-P.Gunji : Punctuated Equilibrium under the Artificial Selection