

揺らぐ拡散係数を持つランジュバン方程式

(慶大理工¹、金沢大理工²、鳴教大教育³) 秋元琢磨¹、畝山多加志²、宮口智成³

【はじめに】近年、細胞内における生体分子の拡散において、平均2乗変位 (MSD) が劣線形に増大する“遅い拡散”が1分子測定実験により頻繁に観測され、注目が集まっている。1分子測定では、1分子の軌道の時系列から MSD の長時間平均 (TAMSD) が計算されるが、MSD は劣線形に増大するだけでなく、分子毎にその一般化拡散係数が1、2桁異なってくるのがわかってきた。このような拡散係数の大きな揺らぎの理論はまだできていない。我々は、拡散係数の揺らぎに注目し、からみあい高分子のモデルにおいて TAMSD の揺らぎの観測時間依存性 (相対揺らぎ) をシミュレーションにより解析した[1]。その結果、相対揺らぎがプラトーから通常減衰 (-0.5乗で減衰) へ遷移するクロスオーバー現象を発見し、さらに、からみあい高分子の最長緩和時間とこのクロスオーバー時間が比例関係にあることを発見した。本研究では、このクロスオーバー時間と最長緩和時間の関係を理論的に明らかにするため、拡散係数が時間的に (ランダムに) 揺らぐランジュバン方程式[2]を考え、上で述べた関係を理論的に示す。このランジュバン方程式は、からみあい高分子の可解モデルであるレプテーションモデルにおける高分子の重心の運動と密接な関係がある。

【結果と考察】

本研究で扱うランジュバン方程式は、 $dr(t)/dt = \sqrt{2D(t)}w(t)$ である。ここで、 $r(t)$ は位置、 $w(t)$ はホワイトガウシアンノイズであり、拡散係数 $D(t)$ はそれとは独立な確率過程とする。レプテーションモデルでは、拡散係数は末端間ベクトルと関係する。主な結果として、TAMSD の相対標準偏差 $\Sigma(t; \Delta) \equiv \sqrt{\langle [\delta^2(\Delta; t) - \langle \delta^2(\Delta; t) \rangle]^2 \rangle} / \langle \delta^2(\Delta; t) \rangle$ は、観測時間が短い領域ではプラトー、長い領域では通常の減衰を示すことを紹介する：

$$\Sigma^2(t; \Delta) \approx \begin{cases} \psi_1(0) & (t \ll \tau), \\ \frac{2}{t} \int_0^\infty ds \psi_1(s) & (t \gg \tau). \end{cases}$$

ここで、 $\psi_1(s)$ は拡散係数の相関関数であり、 τ は $\psi_1(s)$ の緩和時間である。この結果をレプテーションモデルへ適用すると、クロスオーバー時間と緩和時間が比例関係にあることを示すことができる。これは、[1]で得られた結果をよく説明している。また、過冷却液体の動的不均一性を説明する簡単なモデルである2状態モデル (遅いモードと速いモードを時間的に遷移するモデル) へ応用することにより、TAMSD の揺らぎから拡散係数の緩和時間を知ることができることも報告する。

【参考文献】

- (1) T. Uneyama, T. Akimoto, and T. Miyaguchi, J. Chem. Phys. **137**, 114903 (2011).
- (2) T. Uneyama, T. Miyaguchi, and T. Akimoto, arXiv:1411.5165 (2014).