

傾斜粉体層への斜め衝突クレータリングのスケーリング解析

(名大環境学) 滝澤 真太, [○]桂木 洋光

【はじめに】

レゴリスと呼ばれる砂の堆積層に覆われている天体表面への隕石の衝突によるクレータ形成は天体表面の進化史を考える上で最も重要な素過程の一つと考えられている。そのため、これまでに多くのクレータ形成の物理機構解明を目指した粉体衝突実験が行われてきた。粉体をはじめとしたソフトマター・ターゲットへの固体弾衝突陥入現象は、ソフトマター物性を計測する手法としても興味を持たれ、盛んに研究が行われている。しかしながら、それらの研究の多くが、水平なターゲット（粉体層）表面に固体球を鉛直衝突させる実験であった。一方で実際（天然）の天体衝突は地表面に対して斜めに入射することがほとんどであり、天体の地表面には多くの起伏富んだ傾斜地形も存在する。これらの要因に着目し、これまでは水平な粉体表面に対する斜め衝突実験や傾斜粉体表面への鉛直衝突実験がそれぞれ独立に行われてきた。しかし、衝突角 φ と粉体表面の傾斜角 θ を系統的に変化させた実験はこれまで行われていない。さらに、 φ と θ の効果をパラメーターとして含んだクレータ形状に関するスケーリング則についても明らかにされていない。そこで本研究では、衝突角 φ と傾斜角 θ を系統的に変化させる粉体衝突実験を行い、 φ と θ の効果を含んだクレータ特徴量(直径、深さ、体積、直径)のスケーリング則を明らかにすることとした。

【結果と考察】

粉体（豊浦砂）を入れた容器を傾斜させることで、傾斜角 θ の粉体表面を作成し、その表面に弾丸を衝突させる実験を行った。その際、高速度カメラで衝突の様子をとらえ、弾丸の衝突角 φ 、速度 v_i を測定した。また、最終的に形成されたクレータの三次元プロファイルレーザ変位計によって取得した。得られたクレータ形状のデータからクレータ孔の体積 V_c 等の特徴量を測定した。天体スケールにも適用可能となる V_c の無次元スケーリング則を得るために、以下の無次元量を定義する。

$$\pi_V = \rho_t V_c / m_i, \quad \pi_2 = g D_i / v_i^2$$

ここで、 ρ_t は標的密度、 m_i は弾丸質量、 D_i は弾丸直径、 g は重力加速度である。この π_V は、水平粉体表面への垂直衝突実験($\varphi=90^\circ$, $\theta=0^\circ$)では π_2 によりスケールされることが知らていされる。しかしながら、本研究では φ と θ の影響により π_V vs. π_2 スケーリングの拡張が必要となることが分かった。 φ と θ の影響を適切に考慮することにより、本研究では以下のようなスケーリングを用いて実験データの挙動を説明することに成功した(1)。

$$\rho_t V_c / m_i = 0.14 (\cos \theta)^{4.5} [g D_i / (v_i^2 \sin \varphi)]^{-0.52}$$

【参考文献】

- (1) S. Takizawa and H. Katsuragi, Icarus 335, 113409 (2020).

小規模衝突による傾斜地形緩和に関する実験的研究

(名古屋大学大学院環境学研究科) 大村 知美, 滝澤 真太, 桂木 洋光

【はじめに】

天体表面のクレーターの調査から、地形緩和の効果で形状が浅くなる変化や、小さなものの消去が起こっていることが示唆されている。本研究では地形緩和メカニズムのひとつとして考えられている微小隕石の衝突の素過程に着目し、斜面の傾斜角と衝突条件が緩和の効率に及ぼす影響を調べた。具体的には(1)で行われた傾斜粉体層への低速度衝突実験で得られたデータを用いて、緩和の指標として衝突前後での重心の勾配方向への移動を調べた。

【実験手法】

直方体の容器に直径 0.1–0.3 mm の粒子より成る豊浦珪砂を充填し、任意の角度 θ ($0^\circ \leq \theta \leq 34^\circ$) 傾けたものを標的とした。ばね銃を用いて、標的表面に対して衝突角 Φ ($10^\circ \leq \Phi \leq 170^\circ$) で弾丸を発射した。弾丸は直径 6 mm で、質量が 0.12 g, 0.25 g, 0.4 g のものを用いた。衝突速度は 7–97 m/s で実験を行った。クレーター形成前後の表面の三次元形状はレーザ変位計で測定した。

【解析手法】

弾丸軌道を含む xz 平面内における、エジェクタ堆積及びクレーター崩壊の非等方性による重心移動を考えた。ある基準面に対し、高い部分は正の、低い部分は負の質量を持つとして重心を求め、衝突点からの重心移動距離 Δx を求めた。基準面は、水平面に対する垂直衝突で得られたプロファイルより凹部分のみを抜き出したものを用いて、傾斜角の影響を受けないクレーター短径が対象とするプロファイルと等しくなるように拡大縮小し、衝突点位置をそろえたものとした。

【結果と考察】

$\phi = 90^\circ$ の結果の一部を図 2 に示す。 $\theta = 0$ の場合はエジェクタ堆積及びクレーター孔の崩壊が衝突点に対し等方的に起こるので $\Delta x = 0$ となるが、傾斜角 θ の増加と共に重心の斜面下方向への移動距離は増加した。発表では Δx の $\tan \theta$ 依存性の定式化を行った結果も報告する。

【参考文献】

(1) Takizawa & Katsuragi (2020), Icarus 335 113409.

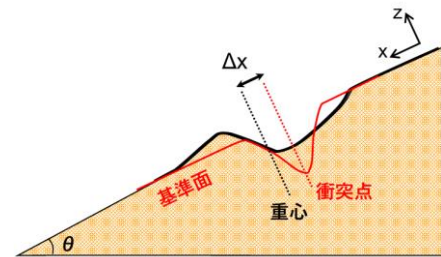


図 1 解析に用いた要素.

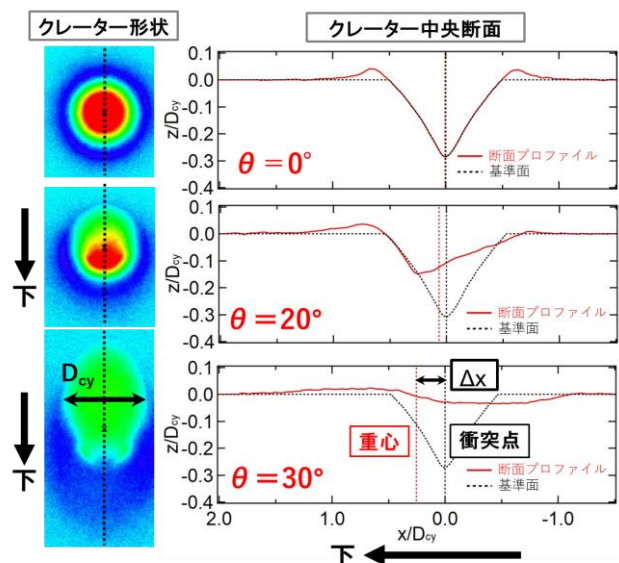


図 2 結果の例。クレーター形状の図中黒点線にあたる断面で解析を行った。D_{cy}はクレーター短径。

アクティブマターのガラス転移

(名古屋大学理学研究科物理系) 小野嘉己, 川崎猛史, 宮崎州正

【はじめに】

アクティブマターとは、自己駆動をする粒子から成る非平衡な系である[1]。アクティブマターは熱平衡な系では見られない特徴的な運動をすることに加えて、系を構成する粒子（アクティブな粒子）を高密度にすることで系がガラス的になることが知られている[2]。従来のガラスの研究では、コロイド粒子などの熱平衡状態にある粒子（パッシブな粒子）を対象としたものが多く、アクティブな粒子を用いたガラスの研究は発展途上である。本研究の目的はアクティブな粒子から成るガラス（アクティブガラス）とパッシブな粒子から成るガラス（パッシブガラス）の類似点、相違点を明らかにすることである。

【結果と考察】

本研究では2次元系でアクティブガラスとパッシブガラスの数値実験による比較を行った。アクティブガラスに関しては Langevin 方程式、パッシブガラスに関しては Active Ornstein-Uhlenbeck Particles (AOUP) モデル[1]により粒子を駆動した。

動的不均一性を調べる手段として、Cage-Relative 相関関数を用いて粒子運動を解析した[4]。Cage-Relative 相関関数は粒子の配置換えを捉えることに特化した関数であり、アクティブマター特有の協同運動の効果を除くことができる。

Cage-Relative 相関関数を調べた結果、Péclet数（アクティブネスの強度を表す指標）が大きいアクティブな系において、パッシブな系では見られないシステムサイズ依存性が明らかになった(図1)。このことから、Péclet数の上昇にともない粒子運動の協同性が強まり、ガラスのスローダイナミクスに影響を与えることが明らかとなった。

【参考文献】

- (1) É. Fodor, M. Marchetti, *Physica A* **504**, 106 (2018).
- (2) R. Ni, *et al.*, *Nat. Comm.* **4**, 2704 (2013).
- (3) H. Shiba, *et al.*, *J. Phys.:Condens. Matter* **30**, 094004(2018).

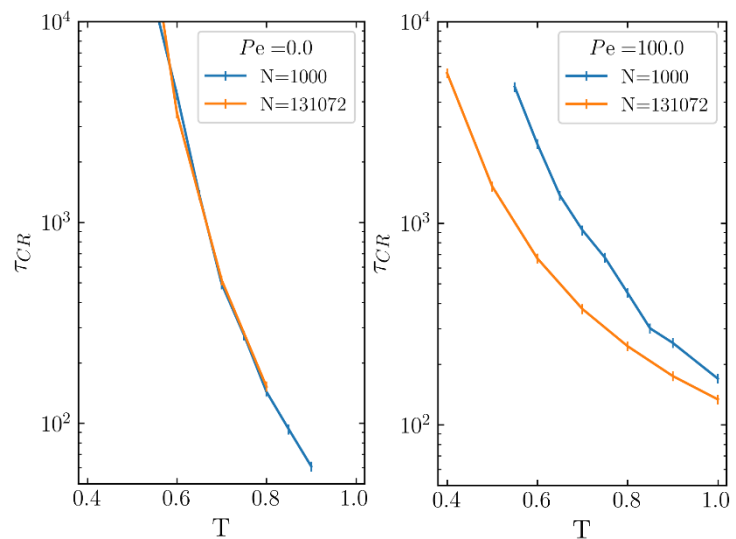


図1. Cage-Relative 相関関数における緩和時間 τ_{CR} の温度依存性を表す。左図がパッシブな系、右図がアクティブな系を表す。

熱的アニールを施したジャミング系のせん断応答

¹名古屋大学理学研究科

² CAS Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences

³ 大阪大学サイバーメディアセンター

倉橋拓良¹、Yuliang Jin²、吉野元³、川崎猛史¹、宮崎州正¹

【はじめに】

ジャミング転移とはランダムな粒子配置の系が流体のように流れる状態から、固体のように流れなくなる状態へと変化する相転移のことである。これまでジャミング転移はある特定の密度で起こると考えられてきたが、近年の研究によって転移点は一意ではなく、ジャミング系の用意の仕方によることが明らかになった[1]。熱的、あるいは力学的にアニールした系の転移密度は従来の値より大きくなることが報告されている[2,3]。

本研究では高密度かつ低温で平衡化した系をジャミングさせ、その系のせん断に対する応答を調べた。

【結果と考察】

始めに系を平衡化するために swap Monte Carlo シミュレーションを行った。高密度での平衡化を行い、転移密度を $\phi_j \approx 0.86$ まで上昇させた。これは従来の $\phi_j \approx 0.84$ と比較して非常に大きな値である。密度がこの転移点より高い系に対して体積を一定にして athermal quasistatic shear をかけ、stress-strain curve を調べたところ、stress が線形に増加する弾性領域に次いで非線形なふるまいを見せる softening が観測され、その後 stress の急激な上昇がみられた。この stress の急激な上昇は、せん断によりアニールの効果が失われ、系のジャミング転移密度が下がり、転移点からの距離が増加したことによるものである。一方、密度が転移点より低い系に対して、同様にせん断をかけたところ、せん断がある値に達したところで stress の値が有限となる shear jamming が観測された。この shear jamming も同様に、せん断により転移密度が系の密度よりも低くなったことにより起こる現象であると考えられる。またジャミング系はある程度大きなせん断をかけると、系の応答が弾性から塑性へと変化する yield 転移を起こすが、系がこの yield 転移を起こした後もしばらくの間 stress が変化し続けることを発見し、さらにこの変化は対数関数的であることがわかった。最後に、系に大きなせん断をかけアニールの効果が完全に失われた状態でのジャミング転移密度を調べた結果、この転移密度はアニール直後の転移密度よりは低い、全くアニールしていない系の転移密度よりは高くなることがわかった。

【参考文献】

- [1] Pinaki Chaudhuri, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 165701 (2010)
- [2] Misaki Ozawa, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 205701 (2012)
- [3] Y. Jin, P. Urbani, F. Zamponi, and H. Yoshino, Sci. Adv. **4**, eaat6387 (2018)

ガラス形成液体の振動状態密度とフラジリティ依存性

(阪大院基礎工, 東大院総合文化*) 大門翔太, 水野英如*, 金鋼, 松林伸幸

【はじめに】

固体には、規則正しく周期的に配列した結晶と不規則に非周期的に配列したガラスの二種類が存在する。結晶の熱的性質はその周期性によりデバイ則に従う。一方で、ガラスは非周期性によりデバイ則より乖離する。ガラスの異常な熱的振る舞いは、ガラスの振動状態密度 $G(\omega)$ が低周波数領域においてデバイ則よりも過剰な振動モードを持つボゾンピークに起因するとされている。近年、**Harmonic** ポテンシャル、**LJ** ポテンシャルを用いたガラスにおいて、ボゾンピークを示す周波数よりも低周波数領域で結晶では現れない空間的に局在化した振動モードが存在し、デバイ則に従わないことが明らかになった[1]。しかし、現実の系との対応はいまだに明らかになっていない。また、ガラスはフラジリティ(活性化エネルギーの温度依存性)によって動的性質などが変化することが知られているが、振動状態密度に関しては明らかになっていない。そこで本研究では、大規模分子動力学シミュレーションを用いて、局在化モードのフラジリティ依存性について解析した。特に、アモルファスシリカに対して提案された **Coslovich-Pastore(CP)**モデル[2]を拡張した **Generalized CP (GCP)**モデル[3]を採用した。このモデルでは異成分間に働く引力の大きさを調整することによって、フラジリティが制御できることが知られている[3]。

【結果と考察】

GCP モデルにおいて、ネットワーク型ガラス(**strong glass**)とパッキング型ガラス(**fragile glass**)を用いて、基準振動解析を行った。振動モード k に関与する粒子の割合である P^* を用いて振動の局在性を定量的に評価した。**Figure 1** に固有振動数 ω に対する $G(\omega)/\omega^2$ を示す。デバイ理論によれば低周波領域の振動状態密度が $G(\omega)=A_D\omega^2$ (A_D :デバイレベル)となるが、デバイレベルよりも過剰な振動(ボゾンピーク)がいずれの系においてもみられた。また、ボゾンピーク周波数よりも低周波領域においてデバイレベルへの収束がみられた。さらに、この低周波領域での P^* が 0 に近づくものと 1 に近づくものに分離することが確認できた。これにより、先行研究で報告された空間的に局在化した振動モードが、モデル及びフラジリティに依存せず存在することが分かった。ここで、 $P^* < 0.01$ を **localized mode** と定義すると、**localized mode** の振動状態密度がフラジリティによらず $G_{loc}(\omega) \propto \omega^4$ に従うことを見出した。解析とその結果の詳細については当日に発表する。

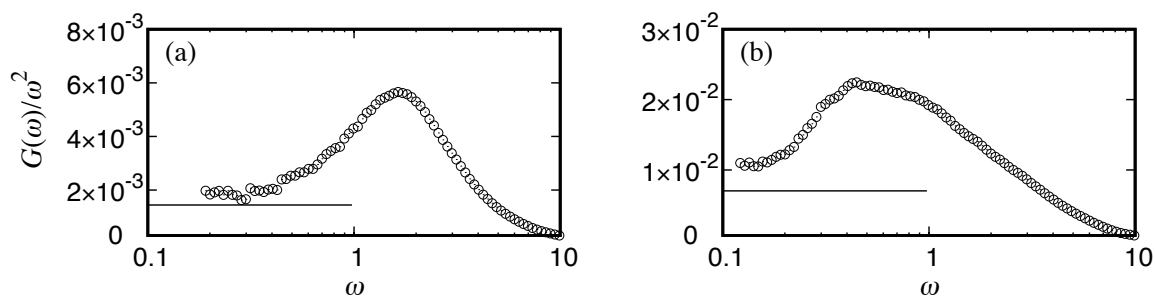


Figure 1: Plots of the reduced vDOS $G(\omega)/\omega^2$ and Debye level A_D (horizontal line).

(a) Network glass (strong glass). (b) Packing glass (fragile glass).

【参考文献】

- (1) H. Mizuno, H. Shiba, and A. Ikeda, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 114, 9767 (2017).
- (2) D. Coslovich and G. Pastore, *J. Phys.: Condens. Matter* 21, 285107 (2009).
- (3) M. Ozawa, K. Kim, and K. Miyazaki, *J. Stat. Mech.* 074002 (2016).

純粋剪断を受ける粉体の Shear Jamming

(¹ 島大院自然科学, ² 阪大基礎工) 市龍太郎¹, 大槻道夫²

【はじめに】

粉体は巨視的な粒子の集合体で、その振舞いは充填率がジャミング転移点を越えるかどうかによって流体的なものから固体的なものへと変化する。この変化はジャミング転移と呼ばれる。従来は充填率を高くすることのみによって固体的な状態が発生すると考えられていたが、近年では転移点以下の充填率であっても、剪断を加えることで流体的な状態から固体的な状態へと遷移するシアジャミングと呼ばれる現象の発生が認識されるようになってきている。

初期のシアジャミングの研究⁽¹⁾では、2次元光弾性円盤系に純粋剪断を加えて応力鎖のパークレーションの異方性からシアジャミングを定義し議論していた。一方で、近年のシアジャミングの研究⁽²⁾では、単純剪断のシミュレーションで力学的特性からシアジャミングを定義し議論している。ただし、単純剪断のシミュレーションは周期境界条件を用いているので、応力鎖のパークレーションの異方性を議論出来ず、力学的特性との関係は不明なままであった。

【結果と考察】

本研究では、シアジャミングにおける力学的特性と応力鎖のパークレーションの関係を議論するために、粒子間摩擦のある粉体に純粋剪断を加えるシミュレーションを行った。

まず、ジャミング転移点以下の充填率でひずみ速度一定の純粋剪断を加えたところ、我々の系においても応力鎖が系全体に広がるシアジャミングの発生が確認出来た。ただし、実験で報告された圧縮方向にのみ応力鎖が浸透する異方的なパークレーションを確認することは出来なかった。一方、応力ひずみ曲線を見てみると、微小なひずみによって応力が増大し固体的な振る舞いをするシアジャミングの発生が観測された。また、ひずみの位相に依存して固体的な振舞いと流体的な振舞いの両方が発生する特異的な状態も観測された。発表ではさらに、幾何学的な特性による評価と力学的な特性による評価の関連を調べた結果について議論する。

【参考文献】

- (1) Bi, D., Zhang, J., Chakraborty, B. & Behringer, R.: Jamming by shear, Nature 480 (2011) 355.
- (2) Otsuki, M. & Hayakawa, H.: Shear jamming, discontinuous shear thickening, and fragile state in dry granular materials under oscillatory shear, (2018) arXiv:1810.03846.

周期的ローレンツガスにおける二段階緩和

(首都大 理 物理) 中原 祥博, 首藤 啓

【はじめに】

過冷却液体状態からガラスになる際、僅かな温度変化や密度変化で粘性が急増することが実験からわかっている。この粘性の急増メカニズム（スローダイナミクス）については、古くから様々な議論があるが、多くの先行研究から、低温または高密度条件では周りの粒子の囲い込みによって拡散が妨げられるケージ効果がその原因となっていることがわかっている。ケージ効果は、平均二乗変位や相関関数の中間時間領域に時間変化の小さいプラトーとなって現れる。

一般的にスローダイナミクスの本質は、ケージ効果を作る多体性と結晶化を阻害するためのランダムネスであるとされるが、そもそも多体性やランダムネスを持たない系で何が言えるのかはこれまで十分整理されてこなかった。そこで本研究では、周期的ポテンシャル中の1体系を系統的に調べることにより、ガラスや過冷却液体に見られるケージ効果やスローなダイナミクスのどこまでが多体性やランダムネスからくるものかを考える。

【結果と考察】

本研究では、三角格子状に障害物となる円盤を固定しその隙間を1つの質点が障害物と衝突しながら運動するローレンツガスモデルを調べた。このモデルにおいて平均二乗変位などを調べた結果、多体系での結果と同様に中間時間領域にプラトーが現れることがわかった（図1）。また、ケージ領域の平均滞在時間はローレンツガスのギャップの大きさに対して、モード結合理論同様、冪で振る舞うことがわかり（図2）、これは力学系の研究で用いられる escape rate のホールの大きさ依存性から自然と導出することができる。

以上より少なくとも、モード結合理論から導かれる帰結の多くは、実は1体のローレンツガスで実現されていることになる。

図 1

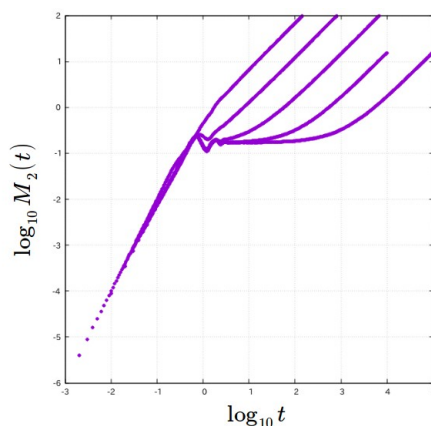
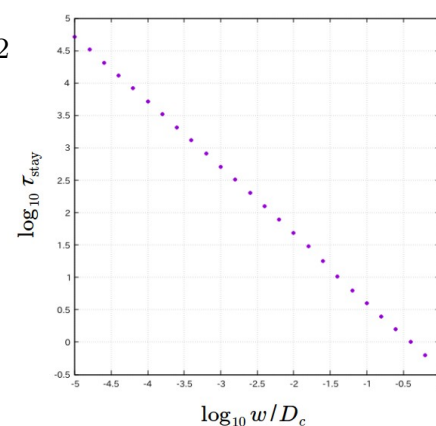


図 2



Ginzburg-Landau モデルの非平衡下のパーコレーション転移

(東京大学大学院総合文化研究科) 中西 亮, 福島孝治

Ginzburg-Landau (GL) モデルはそのダイナミクスも含めて、液晶や磁性体をはじめ多くの現象に普遍的な有効モデルである。また、近年の計測技術の発展により、磁性体の磁区のパターンの時間変化のイメージングを詳細に得ることができるようになってきている (1、2)。このため、GL モデルによる定量的な研究の必要性が増している。

強磁性体薄膜に対して磁場を掃引すると、その掃引速度速度に応じて、迷路状や島状などの様々な磁区のパターンが観測される (1)。この現象については時間依存の GL 方程式を用いた数値実験で、掃引速度に応じて迷路状や島状のパターンが現れることが再現されている (3)。しかし、迷路状のパターンや島状のパターンの明確な区別は今までされていなかった。このため、本発表では強磁性体薄膜のモデルで磁場の掃引速度に応じて現れる島状のパターンと迷路状のパターンの間に見られるパーコレーション転移の可能性について数値計算を通じて検討した。

磁区のパターンの時間発展は、以下のように時間依存の GL 方程式で記述される。この方程式はスピンの異方性、磁場、交換相互作用、双極子相互作用の効果を考慮したものである。

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial t} = -\alpha(-\phi + \phi^3) - h - \beta \Delta \phi + \gamma \int d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}') G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$$

ここで $\phi(\mathbf{r})$ はスピン変数、 h は磁場、 $G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ は双極子相互作用を表す。 α, β, γ は物質固有の定数である。この方程式を擬スペクトル法によりフーリエ変換し、半陰的解法を用いて解いた。

ここでドメインのパーコレーション確率を GL 方程式によって得られたパターンから評価し、その有限サイズスケール解析を行った。この結果について報告を行う。

【参考文献】

- (1) K. Kudo, M. Mino, and K. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 013002 (2007).
- (2) P. Domenichini et. al, Phys. Rev, B 99, 214401 (2019)
- (3) Kudo, K. Nakamura, Phys. Rev. B 76, 054111 (2007).

水素結合ネットワークに基づくケージ・ジャンプモデルの開発とその過冷却水における拡散ダイナミクスへの応用

(阪大院基礎工) 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸

【はじめに】

ガラスは無秩序な分子配列のまま固化した状態である。過冷却液体の温度低下に伴い液体の運動性は急激に低下し、ガラス転移温度以下で運動性が凍結される。そのため過冷却液体はガラス転移を起こす原因を解明するための本質的な情報を保持している。過冷却液体において分子の運動性低減はケージ効果と呼ばれる現象論的モデルで一般に説明される。ケージ効果とは、過冷却液体の分子が周囲の分子によって形成されるケージに一時的に囚われ、長時間の拘束された後、ケージが崩壊して囲まれた分子がジャンプするという描像である(1)。

そこでケージ効果描像に基づき、短時間における分子のダイナミクスをケージに囚われているケージ状態とケージから解放されたジャンプ状態の 2 状態に分離するケージ・ジャンプモデルの開発に多くの関心が集まっている。最近、Pastore らは平均二乗変位(MSD)において運動性が停滞するプラトー領域に閾値を設定し、分子単体の短時間ダイナミクスをこの閾値と比較することでケージ状態とジャンプ状態に分離する手法を提案した(2)。本研究ではこのケージ・ジャンプモデルを過冷却水に対して発展させることを目的とする。TIP4P/2005 モデルを用いて分子動力学計算を行い、ケージ・ジャンプモデルを開発した。特に短時間ダイナミクスの特徴づけを水素結合ネットワークの組み換えダイナミクスに基づいている(3)。

【方法 (実験・理論)】

本研究の全シミュレーションは GROMACS2016.4 を用いて計算を行った。TIP4P/2005 モデル 8000 分子、密度を 1 g/cm³ で一定にし、350 ~ 190 K の各温度において NVT 一定条件下で十分に平衡化し、その後 NVE 一定条件下で計算を行った。各温度における各分子の軌道から、分子間の距離・角度の様々な組み合わせの分布関数を解析し、OO 間距離 0.35 nm、O-OH 角度 30 度以下として水素結合の定義域を決定した。この水素結合領域に存在する分子の数を結合しているとみなし、各分子の結合数の時間変化を追跡し、結合数が一定数以上の場合には周辺の分子により運動が阻害されているケージ状態と、一定数以下の場合では分子が拡散的な運動をしているジャンプ状態とを区別し、それぞれの状態の継続時間とジャンプ状態での移動距離の確率分布を求めた。

【結果・考察】

図 1 に TIP4P/2005 モデルの 280 K 以下の MSD と、本研究で開発したケージ・ジャンプモデルにより分割された、ジャンプ状態における分子の平均移動時間を示す。260 K 以下の MSD にはプラトー領域が現れるが、これはケージ効果により運動性が低減する部分とである。ジャンプ状態における分子の平均移動時間は全ての温度領域においてこのプラトー部分より値が大きく、ジャンプ状態そのものには運動性低減をもたらす効果が含まれていないことを示す。

【参考文献】

- (1) C. A. Angell, *Science*, 267, 1924–1935 (1995).
- (2) R. Pastore, *et al.*, *Soft Matter*, 10, 5724–5728 (2014).
- (3) T. Kikutsuji, K. Kim, and N. Matubayasi, *J. Chem. Phys.*, 150, 204502 (2019).

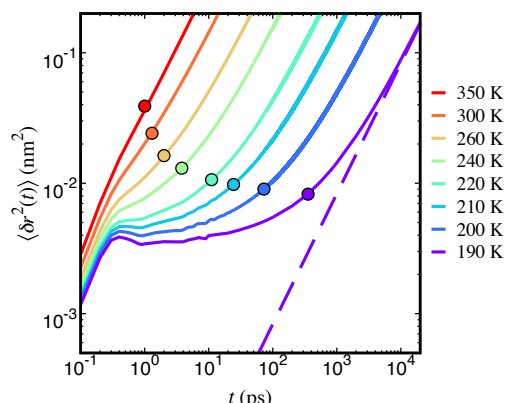


図 1 : 各温度における MSD : $\langle \delta r^2(t) \rangle$ 。点は各温度におけるジャンプ状態の平均移動距離を示す。紫の点線は 190 K における MSD の長時間振る舞いに対する自己拡散係数のフィッティング線を表す。

理想気体中のトレーサーの短時間ダイナミクス

(名大院工) 仲井 文明, 畝山 多加志, 増渕 雄一

【はじめに】

溶媒中の粒子（以降トレーサー）の短時間のダイナミクスは、ガウシアンノイズを仮定した一般化ランジュバン方程式（GLE）^[1]では記述できない。現状、トレーサーの短時間ダイナミクスの理解は十分ではない。トレーサーの短時間ダイナミクスを理解するために、まずは理想化した単純な系を理解する必要があると考え、本研究では周囲流体を理想気体とした。

【方法】

トレーサーのダイナミクスをシミュレーションで解析した。周期境界を課したボックス中にサイズ σ のトレーサーを1個導入し、トレーサーと重ならないようにサイズ0の理想気体粒子を10万個ランダムに配置した。各粒子の初期速度はマクスウェルボルツマン分布に従うように生成した。粒子の座標と速度の時間発展は剛体シミュレーションの手法^[2]に従った。トレーサーサイズ σ 、系の温度 $k_B T$ 、理想気体粒子の質量 m で規格化した。本系は、トレーサーの質量 M と理想気体の数密度 ρ のみがパラメータとなる。また、トレーサーと理想気体粒子のみが相互作用する。

【結果と考察】

ρ が1より十分小さい場合、トレーサーと理想気体粒子の個々の衝突は独立になり、トレーサーのダイナミクスは比較的簡単になる。 M が1より十分大きいとトレーサーの変位はガウシアンになり、トレーサーのダイナミクスはガウシアンノイズを仮定したGLEで近似的に記述できる。本研究では未知の領域である、 M が1より小さい場合、 ρ が1より大きい場合を対象とした。 M が1より十分小さく ρ が1より十分大きいと、平均二乗変位（MSD）はブラトーを示し速度の自己相関関数（VACF）は負の相関を示した。周囲流体が理想気体である系で上記の現象が生じたという報告例はない。個々の衝突が独立な場合、VACFに負の相関が生じるには次の2つが必要条件になる^[3]。すなわち「 $\gamma = \langle \mathbf{V}_p \cdot \mathbf{V}_{p+1} \rangle < 0$ であること」および「衝突の時間間隔の分布 $P(\tau_p)$ が指数分布からずれること」である。ここで $\mathbf{V}_p$ はトレーサーが p 回目に理想気体粒子と衝突する直前の速度、 τ_p は $p-1$ 回目と p 回目の衝突時間の間隔である。本系ではパラメータによらず γ は正になり、 $P(\tau_p)$ はおおよそ指数分布になった。よって、衝突は独立ではない。複数回の衝突の相関を見る必要があると考え、 $\gamma(n) = \langle \mathbf{V}_p \cdot \mathbf{V}_{p+n} \rangle$ という指標を新たに導入し解析した。 M が1より十分小さく ρ が1より十分大きいと $\gamma(n)$ は $n \geq 3$ から負になるという非自明な結果が得られた。これは、3回目以降の衝突で何かの相関が生じたことを意味する。理想気体粒子同士は相互作用しないので、存在しうる相関は「同じ理想気体粒子と衝突する事象」により生じると考えられる。 $\gamma(n)$ を1回目と n 回目に同粒子、異粒子に衝突した場合に分けて解析したところ、「同粒子と衝突する事象」が $\gamma(n)$ が負になる現象を引き起こすことがわかった。

【結論】

理想気体中のトレーサーのダイナミクスをシミュレーションした。 M が1より小さく ρ が1より大きいとMSDやVACFに非自明な挙動が生じた。これは「トレーサーが同じ理想気体粒子と複数回衝突する事象」により引き起こされることがわかった。

【参考文献】

[1] H. Mori, Progress of Theoretical Physics 33, 423 (1965). [2] B. J. Alder, D. M. Gass, and T. E. Wainwright, Journal of Chemical Physics 53, 3813 (1970). [3] A. I. Burshtein and M. V. Krongauz, Journal of Chemical Physics 102, 2881 (1995).

水中でのイオン解離のダイナミクスを特徴づける反応座標の探索： コミッターと最尤推定法の融合

(阪大院基礎工*, 分子研**)

森勇介*, 菊辻卓真*, 岡崎圭一**, 森俊文**, 金鋼*, 松林伸幸*

【はじめに】

凝縮系では、様々な自由度が複雑に結合しており、その系の振る舞いを理解するのは困難である。このような大自由度系における様々な安定状態に対する遷移経路を理解するにあたって、系に関する膨大な数の変数の中から 1, 2 個の変数を選択し、それを反応座標として描いた自由エネルギー曲面(平均力ポテンシャル)が頻繁に用いられている。このとき用いられる反応座標は、一般に物理的直観に基づいて選択されているが、その反応座標に対して記述される自由エネルギー曲面が各安定状態間の遷移状態を適切に記述できているかは非自明である。特に、溶媒の自由度も加わった複雑な系では、反応座標の選択そのものが困難になるという難題を抱えている。

本研究では、NaCl の水中でのイオン解離過程について分子動力学シミュレーション(MD)を行った (Fig. 1)。イオン解離の系では一般に、イオン間距離を反応座標に用いることが多いが、溶媒の効果が必要であることが明らかになっている(1)。そこで、解離のダイナミクスにおける溶媒の自由度を考慮した。結合状態・解離状態の二つの安定状態間の遷移状態に対して、任意の構造に対して結合状態より先に解離状態へ遷移する確率であるコミッターという指標を定量化し、それらに最尤推定法を組み合わせることで、遷移状態を正しく表現する反応座標の探索を行った (2)。

【結果と考察】

水中の NaCl のイオン解離についてイオン間距離 r_{ion} に対する平均力ポテンシャルは Fig. 2 になる。0.37 nm 近傍にピークがあり遷移状態を規定することが期待されるが、この構造でのコミッターは 1/2 から乖離することがすでに知られている (1)。つまり r_{ion} だけでは正しい遷移経路を予測できない。そこで最尤推定法を用いると、イオン間距離 r_{ion} に加え、NaCl のイオン対の周囲に存在する水分子が解離するにあたって遷移状態を正しく評価する反応座標としてのほたらきがあることがわかった。特に Na⁺の第一溶媒和圏に存在する水分子が移動し、遠方に存在していた水分子が Cl⁻の方へと入り込むことでイオン解離が引き起こされていることがわかった。

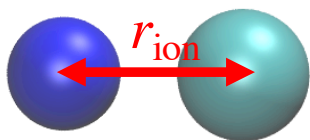


Fig. 1. NaCl とイオン間距離 r_{ion}

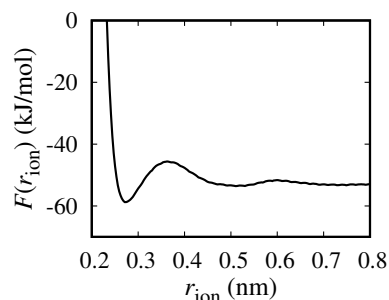


Fig. 2. NaCl のイオン間距離 r_{ion} に対する自由エネルギー $F(r_{\text{ion}})$

【参考文献】

- (1) P. L. Geissler, C. Dellago, and D. Chandler, *J. Phys. Chem. B*, **103**, 3706 (1999).
- (2) B. Peters and B. L. Trout, *J. Chem. Phys.*, **125**, 054108 (2006).

2 成分剛体円板系における最近接粒子の判定法とその特徴

(名古屋工業大学) 児山弘昌, 磯部雅晴

【はじめに】

多体粒子系のシミュレーションにおいて正しく最近接粒子(Nearest Neighbor(N.N.))を判別することは、秩序変数等を定量的に評価するために重要である。しかし、それを決定する厳密な定義はない[1]。よく使用されるアルゴリズムとしてカットオフ法とボロノイ法が知られている。カットオフ法では、パラメータとしてカットオフ距離が導入され、その距離は動径分布関数の最初の最小値に設定されることが多い。一方、ボロノイ法では、たとえば 2 次元の場合、ある粒子と周囲の粒子の中心を直線で結び、その垂直二等分線で多角形を作成し、辺を共有する多角形に属する粒子を N.N とする。カットオフ法では、多成分系や不均一系においてパラメータに任意性が生じ複雑となる。また、ボロノイ法では遠距離の粒子と非常に短い辺を共有しても N.N と判別され、わずかな熱ゆらぎに対して不安定という欠点がある。近年、これらの問題を解決するため、パラメータがなく効率的なアルゴリズムが提案された[1]。3 次元系で立体角を導入したため、「Solid-Angle based Nearest Neighbor algorithm」(SANN)と呼ばれる。このアルゴリズムには次の利点がある。(i) 不均一な系に適用できる、(ii) 熱ゆらぎに安定である、(iii) パラメータがない、(iv) 計算効率がよい。この手法は 3 次元で提案されたが 2 次元系への適用は、非線形方程式を数値的に解く以外は同じ手順で実装できる[2]。本研究では、ガラスのモデル系として用いられる 2 成分剛体円板系[3]において、これらの手法を適用した結果を比較し、その特徴を系統的に調べた。

【結果と考察】

高密度な 2 成分剛体円板系において、Event-Driven 型分子動力学シミュレーションを実行し得られた配置の時系列データを用い、カットオフ法、ボロノイ法、SANN 法の 3 つの手法を適用した。系内には大小 2 種類の大きさ(直径比 1.4:1)、モル分率 1:2(小さな粒子が多い)の粒子を合わせて $N=4096$ 個入れ、粒子占有率を $v=0.72$ (液体)、 0.76 (クロスオーバー)、 0.78 (過圧縮液体)と変化させ、それぞれ 300 個の配置の時系列データを用いて解析を実行した。

図 1 に $v=0.78$ における各手法で得られた N.N.数のヒストグラムを示す。SANN 法では N.N.数は 5 が最も大きく、カットオフ法、ボロノイ法では 6 が最も大きい。N.N.数が 7 はボロノイ法が他の手法に比べかなり大きい。これはボロノイ法では遠くにある粒子も N.N.と判定されているためである。高次近接粒子では、カットオフ法では第 3 近接以降は動径分布関数によるカットオフ距離の設定[4]が困難となった。一方、SANN 法では高次近接粒子まで曖昧さなく厳密に判別できた(図 2)。2 成分剛体円板系においても 2 次元版の SANN 法は、安定かつパラメータを設定する必要なく、高次近接粒子の判定も行えることがわかった。

【参考文献】

- (1) J. A. van Meel, L. Filion, C. Valeriani, and D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **136**, 234107 (2012).
- (2) M. Isobe, *Mol.Sim.* **42**, 1317 (2016).
- (3) M. Isobe, A. S. Keys, D. Chandler, and J. P. Garrahan, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 145701 (2016).
- (4) M. Isobe and B.J. Alder, *J.Chem.Phys.* **137**, 194501 (2012).

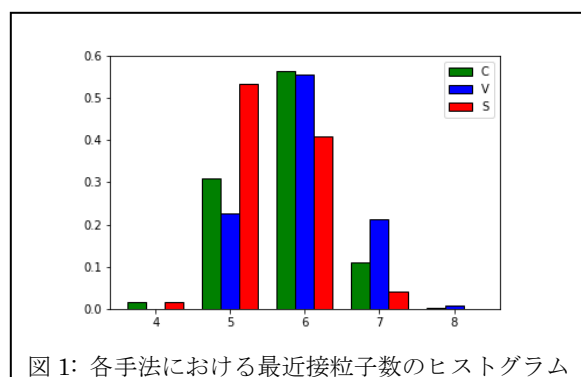


図 1: 各手法における最近接粒子数のヒストグラム

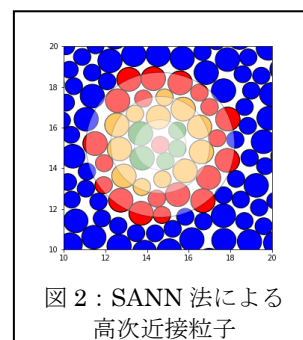


図 2: SANN 法による高次近接粒子

回転外部磁場下における磁気回転子の集団運動に関する研究

河合 拓真¹, 松永 大樹¹, Fanlong Meng², Ramin Golestanian²

(大阪大学大学院基礎工学研究科¹, Max planck Institute for Dynamics and Self-Organization²)

【はじめに】近年磁性コロイドの集団運動に関する研究が行われており，その中に外部磁場を印加し磁気回転子の集団運動および周囲の粘性流体を制御する研究がある[1]. 本研究では，同一平面上に格子状に配置された磁気回転子を，一定の角速度で回転する外部磁場により制御することを試みる．3行3列の系着目したところ，外部磁場の大きさを変えることで，3種類の集団運動を観測することができた．

【結果と考察】外部磁場が十分大きいとき，すべての磁性回転子はその磁気モーメントが外部磁場の回転に追従して回転する (Synchro pattern, 図 1 (a)) . 一方で，外部磁場が十分弱い場合，流体からの粘性抵抗と磁気相互作用の影響で磁気回転子は回転することができず，ただ振動するだけである (Oscillate pattern, 図 1(c)). そして外部磁場の強さが中程度の場合，4 隅と真ん中の回転子は外部磁場と同じ方向に回転するが，残りの 4 つの回転子は外部磁場と逆方向に回転する (Chessboard pattern, 図 1(b)).

この chessboard pattern がなぜ生じるかについて考察する．3 行 3 列のシステムの場合，外部磁場がなければエネルギー的に安定な stripe configuration もしくは spin-ice configuration(図 2)に落ち着く．そこに，中程度の大きさの外部磁場が印加されたとき，その外部磁場の向きと同じ向きの磁気モーメントを持つ磁気回転子が多い spin-ice または stripe configuration が選択される．その連続的な遷移が結果的に chessboard pattern を実現することになると考えられる．

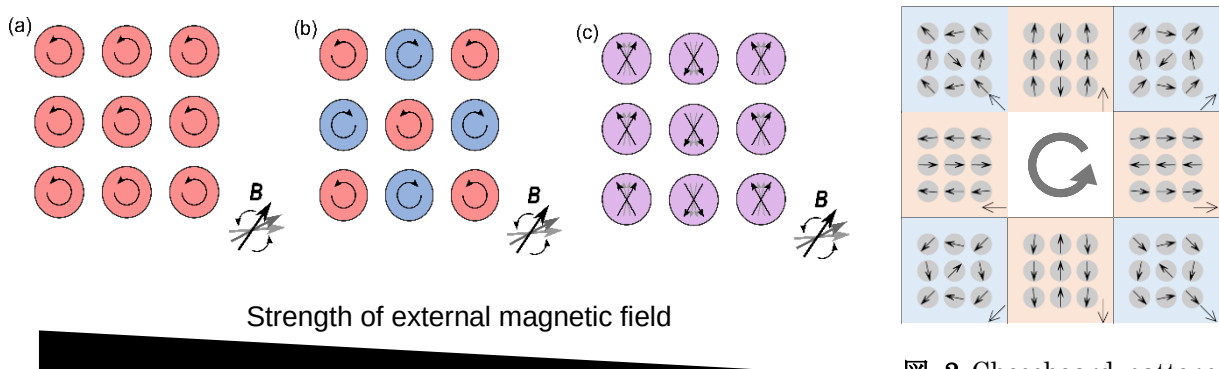


図 1 3つの回転運動パターン．右下の B は外部磁場を表す．

(a) synchro pattern. (b) Chessboard pattern. (c) Oscillate pattern.

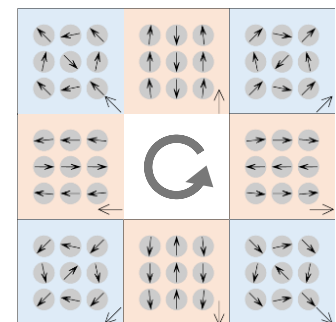


図 2 Chessboard pattern が実現されるとき形状遷移. ピンク色が“stripe”，水色が“spin-ice”.

【参考文献】

(1) Matsunaga, D., Hamilton, J. K., Meng, F., Yeomans, J., & Golestanian, R. (2019). Controlling collective rotational patterns of magnetic rotors. Nature Communication

一般化された Active Ornstein-Uhlenbeck Particle における Hyperuniformity

(名大理) 松山洋道、游夏、川崎猛史、宮崎州正

【はじめに】

鰯のトルネードや、鳥の集団飛行など、生物集団は多彩な集団運動を示す。近年、生物の運動を単純化したモデル系として、自発的な運動を行う粒子であるアクティブマターが盛んに研究されている[1]。アクティブマターは、自己駆動力により強い非平衡性を持つ。アクティブマターの特徴的な振る舞いとして、Motility Induced Phase Separation (MIPS)がある。MIPSは、粒子間相互作用が単純斥力のみにも関わらず、気液相分離に類似した相分離が生じる現象である[2]。この時、系には臨界現象に類似した、長距離の大きな密度揺らぎが生じる。

アクティブマターの理論モデルの一つに、Active Ornstein-Uhlenbeck Particle (AOUP)がある。このモデルでは、自己駆動力が Ornstein-Uhlenbeck 過程で記述される。つまり、自己駆動力は、有限の記憶時間を持つノイズによって生じる。AOUPでも、他のアクティブマターモデルと同様に、MIPSが生じることが知られている[3]。

我々はこの AOUP を拡張し、ノイズの記憶時間 τ_p だけでなく、周りの粒子から受ける相互作用に対しても有限の記憶時間 τ_m を持つモデルである Generalized AOUP (GAOUP)を構築した[4]。このモデルの性質は二つの記憶時間 τ_p と τ_m によって決まり、 τ_m が0の極限では、AOUPに一致し、 $\tau_p = \tau_m$ のときには、平衡系となる(図1)。つまり、このモデルは、AOUPに比べ非常に広い非平衡領域を記述できる。

【結果と考察】

我々は、ブラウン動力学法を用いた GAOUP の数値シミュレーションを行った。その結果、 $\tau_m < \tau_p$ の領域では、AOUPモデルと類似した性質を示し、MIPSを示すことがわかった。一方で、 $\tau_m > \tau_p$ の領域では、Hyperuniformity と呼ばれる現象が生じることがわかった。Hyperuniformity は MIPS とは対照的に、長距離の密度揺らぎが抑制される振る舞いである。Hyperuniformity は、可逆不可逆転移や Jamming 転移の転移点近傍で生じることが知られている[5]。アクティブマター系においても、可逆不可逆転移を示すモデルでは、Hyperuniformityを示すことが報告されている[6]。しかし、我々の GAOUP モデルは先行研究のモデルと異なり、可逆不可逆転移といった相転移的振る舞いを持たない。また、GAOUP では Hyperuniformity を特徴付ける、静的構造因子 $S(k)$ の原点近傍での振る舞いは $S(k) \sim k^{-1.5}$ となり、この指数も先行研究の多くのモデルとは異なっている。今回は GAOUP における Hyperuniformity を含む、この系での非平衡現象について発表を行う。

【参考文献】

- [1] C. Bechinger *et al*, Rev. Mod. Phys. **88**, 045006 (2016)
- [2] Y. Fily and M. C. Marchetti, Phys. Rev. Lett. **91**, 042310 (2012)
- [3] É. Fodor *et al*, Phys. Rev. Lett. **117**, 038103 (2016)
- [4] 游夏, 一般化された Active Ornstein-Uhlenbeck Particle モデル, 修士論文, 名古屋大学 (2019)
- [5] S. Toquato, Phys. Rep. **745**, 1–95 (2018)
- [6] Q. Lei *et al*, Sci. Adv. **5**, eaau7423 (2019)

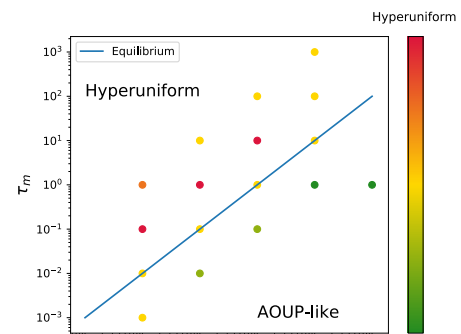


図1: GAOUP モデルのノイズの記憶時間 τ_p と相互作用の記憶時間 τ_m の変化による系の性質の変化。赤点は強い Hyperuniformity を示すパラメータであり、緑点は強い MIPS を示すパラメータである。 $\tau_p = \tau_m$ が平衡系であり、 $\tau_m \rightarrow 0$ の時、AOUP モデルと等価である。

垂直温度勾配下におけるネマチック液晶滴の構造変化

(立命館大理工) 金澤和律、三野蔵太、吉岡潤、深尾浩次

【はじめに】

1900 年、Otto Lehmann によってコレステリック (Ch) 液晶に温度勾配を印加すると分子配向方向が回転する現象が発見された。この現象を再現するものとして、2008 年に P.Oswald らによって、液相と Ch 相の中間の温度領域における 2 相共存状態において、サンドイッチセル内で液体中に分散した Ch 液晶の滴が温度勾配印加によって回転する現象が報告された[1]。さらに 2018 年に、フッ素系オリゴマーを溶媒として Ch 液晶滴を分散させた場合、温度勾配印加による滴の回転速度が 1 桁程度上昇することが報告され、この系においては滴内部に強いマランゴニ対流が誘起されることが示唆された[2,3]。このような回転の加速とともに、同系では、温度勾配を増加させると回転の加速に伴って液晶滴の内部配向が変化する転移現象が観測された。この現象は滴内部の対流と分子配向、および基板による配向規制の相互作用に起因しており、流動、あるいは回転が生じているという条件下で最適な構造が選択されるためであると考えられるが、その詳細なメカニズムは理解されていない。これを解明すべく、本研究では基板にフッ素系樹脂を塗布し、基板による配向規制の影響を比較的小さくした系を実現し、上記の実験を行った。また、簡単のため Ch 液晶滴ではなくネマチック (N) 液晶の滴をフッ素系オリゴマーに分散させた系に対して温度勾配を印加し、その構造を解析した。

【結果と考察】

試料としては、フッ素系オリゴマー PF656(Omnova 社)と N 相を示す E8(Merck 社)を質量比 7:3 で混合したものを用い、これを基板にフッ素系樹脂 CYTOP(旭硝子社)を塗布した厚み 50 μm のサンドイッチセルに挿入した。セル内において溶媒中に分散した液晶滴を偏光顕微鏡で観察したところ、図 1(a)に示すように中心に点欠陥を伴う、十字状の組織が発現した。この点欠陥は温度勾配無印加時には滴の中央に位置していたが、勾配を印加すると中心から離れ、滴の端へと移動した(図 1(c))。ここで基板に水平な方向の欠陥の移動距離 δx を測定したところ、図 2 に示すように上下基板の温度差 ΔT が 5-10K のときに急激に変化することがわかった。すなわち、回転を伴わない N 液晶滴であっても、温度勾配下では平衡状態における配向場が不安定化し、流動に対して安定な構造へと転移することが明らかとなった。発表では、Ch 液晶滴に温度勾配を印加した場合の構造転移についても報告する予定である。

【参考文献】

- [1] P. Oswald and A. Dequidt, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 217802 (2008).
- [2] J. Yoshioka and F. Araoka *Nat. Commun.* **9**, 432 (2018)
- [3] P. Oswald et al., *Soft Matter* **15**, 2591 (2019)

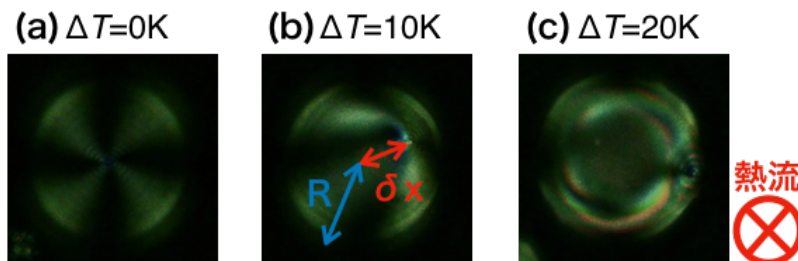


図 1; フッ素系オリゴマー中に分散するネマチック液晶滴の内部配向の温度差による変化

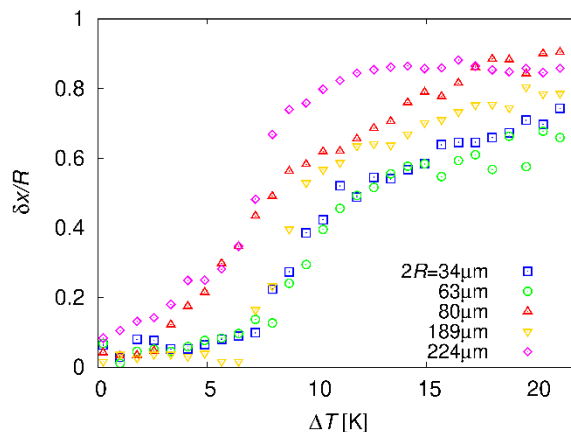


図 2 ; δx の温度差 ΔT 依存性

R は液晶滴の半径

ネマチック-スメクチック A 転移点近傍における縞状組織の発現機構

(立命館大・理工) 崎川 輔・吉岡 潤・深尾 浩次

【はじめに】液晶相のリエントラント現象は 1975 年の報告以降、多くの手法で研究されてきた。特に、ネマチック相(N)-スメクチック A 相(SmA)-リエントラントネマチック相(RN)という相系列を示す 6OCB/8OCB 混合物は、誘電緩和測定[1]、NMR、X 線回折、せん断粘度測定などの実験により精力的に研究されている。しかし、RN 相発現のメカニズムの解明には未だ至っていない。

本研究において我々は、6OCB/8OCB 混合物(モル比 $\Phi=0.42$)を後述のハイブリッドセルに挿入した系において、N-SmA および SmA-RN 転移点近傍で縞状組織が発現し数℃に渡って安定化することを見出した(Fig.1(b),(d))。この現象は、液晶の弾性力、およびセル基板における配向規制力の競合によって生じていると考えられる。そこで我々はフレデリクス転移を利用した弾性定数の測定を行い、弾性自由エネルギーに関する議論から、現象の機構を説明することを試みた。

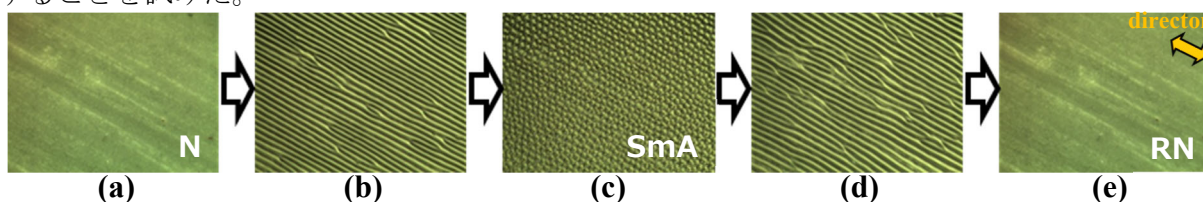


Fig.1 Polarized optical microscopy observation of 6OCB/8OCB mixture ($\Phi=0.42$) in hybrid cell. (a)323K. (b)315K (near N-SmA transition point). (c)313K. (d)307K (near SmA-RN transition point). (e)303K.

【結果と考察】本研究では、試料として 4'-Cyano-4-hexyloxybiphenyl (6OCB, 東京化成)と 4-Cyano-4'-n-octyloxybiphenyl (8OCB, 東京化成)の混合物($\Phi=0.42$)を用いた。6OCB および 8OCB はそれぞれ高温側から、等方相(Is)-75.5℃-N-57℃-結晶相(Cr)、Is-81.0℃-N-67.5℃-SmA-54.5℃-Cr の順で相転移を示す[1]。これらの混合物では、ある濃度で Is-N-SmA-RN-Cr の順で相転移を示すリエントラント現象が発現することが知られている。

Fig.1 は、自作のサンドイッチセルに 6OCB/8OCB 混合物($\Phi=0.42$)を挿入したものを偏光顕微鏡により観察した結果である。ただし、セルの上基板には JALS204 (JSR 社)の塗布により垂直配向、下基板には AL1254 (JSR 社)の塗布により水平配向処理を施した(ハイブリッドセル)。(b)および(d)に示すように、N-SmA および SmA-RN 転移点近傍において観察される縞状組織は常に、水平配向剤による配向制御の方向に平行に形成された。

一般に N 液晶には splay, twist, bend 変形と呼ばれる三種類の変形に対する弾性係数が存在する。6OCB/8OCB 混合系においてこれらを測定すると、bend 弾性係数が最も大きく、加えて N-SmA 転移点に近づくにつれて bend 弾性係数は増大し、緩やかに発散することが判明した。以上より我々は、転移点近傍においては弾性係数の増大に伴い、bend 変形が極端に抑制された配向場が実現されるであろうと考えた。ここで考えられるモデルとして、Fig.2 で図示したような周期的な変形を有した配向場を仮定する。この配向場に対して全自由エネルギーを計算し、その最小化によって変形の周期 l_{st} を求めた結果、 l_{st} はセル厚 d に依存し

$$l_{st} \propto d^{3/4} \quad (1)$$

という関係が近似的に導かれた。実際に実験より変形の周期、すなわち縞間隔を測定すると、その d 依存性は式(1)の関係によってよく説明されることが分かった。詳細は発表で述べる。

【参考文献】

[1]S. Uraban, R. Dabrowski, B. Gestblow, A. Kocot, Liq. Cryst, 27, 1675 (2000)

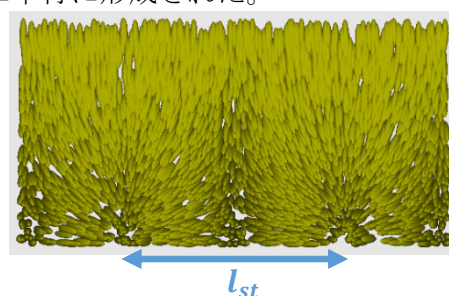


Fig.2 Schematic images of director field near N-SmA or SmA-RN phase transition point in Hybrid cell.

反対符号に荷電したコロイド粒子の会合構造の塩濃度による変化

(名市大院薬) ○三木裕之、豊玉彰子、奥菌透、山中淳平

【はじめに】

正と負に荷電したコロイド粒子は液体中で会合構造(クラスター)を形成する。そのうち、正四面体型のクラスターは、完全フォトリックバンドギャップを持つダイヤモンド結晶格子の基本単位であることから、光学材料への応用が期待されている。しかし、コロイド粒子を混合して得られる会合数(中心粒子に付着した周囲の粒子数) $n=4$ のクラスターは、四面体型だけでなく多様な構造を持つ。本研究では、 $n=4$ のクラスターについて、その構造の対称性を配向秩序パラメータにより定量的に評価し、正四面体に近い構造が多く生成する条件を調査した。実験には粒径 $d=1000\text{ nm}$ でゼータ電位 $\zeta=-50\text{ mV}$ の負電荷粒子と、 $d=850\text{ nm}$ 、 $\zeta=+40\text{ mV}$ の正電荷粒子を使用し、共焦点レーザー顕微鏡により粒子の重心の座標を取得した。また、粗視化分子動力学シミュレーションを行い、塩濃度を変化させた際のクラスターの構造の変化を実験結果と比較した。粒子間の相互作用には Yukawa ポテンシャルと Weeks-Chandler-Andersen ポテンシャルを用いた。

【結果と考察】

今回の実験とシミュレーションの解析は、配向秩序パラメータ q_{tetra} を用いた。

$$q_{tetra} = 1 - \frac{3}{8} \sum_{j=1}^3 \sum_{k=j+1}^4 \left(\cos \theta_{jk} + \frac{1}{3} \right)^2$$

ここで θ_{jk} はクラスターの中心粒子と、周辺粒子 j および k の中心を結ぶベクトルがなす角度である。実験、シミュレーション共に、系の塩濃度の増加に伴いクラスターの対称性が崩れることを観測した。これは、会合した周辺粒子間に働く静電反発力が遮蔽されることにより、周辺粒子が最安定な四面体以外の構造を形成するようになるためと考えられる。また、シミュレーションの結果と比較し、実験系での対称性が低かった。実際の粒子表面は滑らかではなく、会合した粒子が摩擦力により動きにくいいため、最安定な四面体構造を形成するまでに長時間を要し、実験系が平衡状態でないことが考えられる。

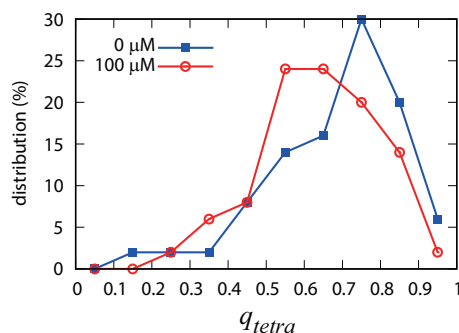


図 1 : NaCl 濃度 = 0 μM 、100 μM のクラスター 50 個についての q_{tetra} の分布

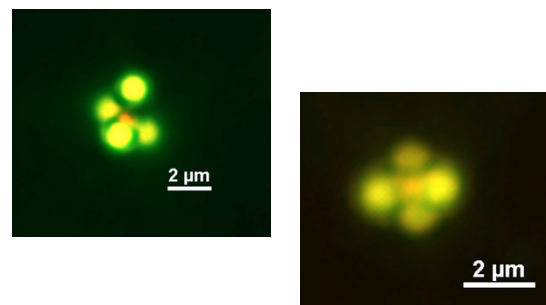


図 2 : $n=4$ のクラスターの顕微鏡写真の例

【参考文献】

- (1) H. Tanaka, *Eur. Phys. J. E*, (2012), **35**, 113.

反対符号の電荷を持つ粒子/平板系と 2 成分粒子系の吸着挙動の相関

(名市大薬¹、名市大院薬²)○石神 瑛圭¹、豊玉 彰子²、奥菌 透²、山中 淳平²

〔緒言〕 反対符号を持つ荷電コロイド粒子は静電相互作用により会合体(クラスター)を形成する。四面体構造を持つ粒子会合体は、ダイヤモンド格子構造などの新規フォトニック結晶の構成単位として、その構築が期待されている。一方、粒子の平板への静電吸着は、表面被覆率をはじめ、結合状態の詳細な解析が容易である。本研究では正に荷電したガラス基板と負に荷電した粒子の吸着(Fig.1(a))に対する添加塩濃度の影響を調査し、四面体型クラスター(Fig.1(b))形成の最適条件と比較した。

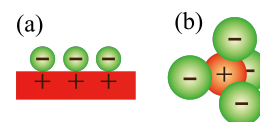


Fig.1 Illustrations of adsorption between (a) particle/plate and (b) particles.

〔実験〕 ガラス表面をpolyethyleneimine (PEI)で修飾し、正荷電のガラス基板(+)を作製した。粒子はシリカ粒子をPEIにより修飾して正荷電のシリカ(+) [粒径 = 1150 nm, ゼータ電位 ζ = +60.8 mV]を、sodium polystyrene sulfonateで修飾して負荷電のシリカ(-) [粒径 = 1150 nm, ゼータ電位 ζ = -47.3 mV] をそれぞれ作製した。系の塩濃度を変化させることで静電相互作用を制御し、光学顕微鏡観察によりガラス基板(+)/粒子(-)間の表面被覆率 ϕ_A と粒子/粒子間の会合数分布を求めた。なお、本実験条件では、1個の中心粒子に対する最大会合数は4であった。

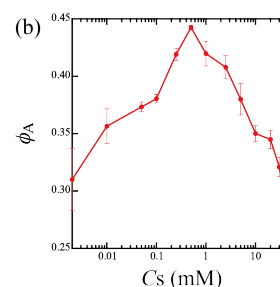
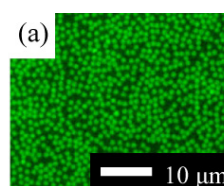


Fig.2 (a) A micrograph showing electrostatic adsorption of the particles on a glass. (b) Area fraction ϕ_A of the adsorbed particles on PEI-modified glasses at various values of NaCl concentration, Cs.

〔結果〕 Fig.2(a)にガラス基板(+)に吸着した粒子の顕微鏡写真を、Fig.2(b)に塩濃度とガラス基板(+)の表面被覆率 ϕ_A の関係を示す。また、Fig.3に塩濃度と四面体型クラスターの形成割合の関係および四面体型クラスターの顕微鏡写真 (inset) を示す。吸着量および正四面体クラスターの生成率とともに、特定の塩濃度で極大を示した。いずれも、イオンによる静電遮蔽のため負電荷粒子同士の静電反発が減少し、ガラス基板の表面被覆率および四面体型クラスター形成率が増加したと考えられる。また、十分な高塩濃度条件で、表面被覆率・四面体型クラスター形成率ともに減少しているのは、反対符号の電荷間のクーロン引力の静電遮蔽によるものと考えられる。

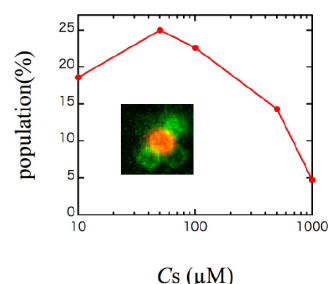


Fig.3 Ratio of tetrahedral cluster vs. Cs. Inset is a micrograph of a tetrahedral cluster.

本研究で用いたシリカ粒子は高比重であり、重力による沈降の影響が大きいいため、宇宙の微小重力環境でのクラスター形成実験と比較検討する予定である[1]。また、粒子/平板系と 2 成分粒子系の相互作用ポテンシャルについても併せて報告する。

〔参考文献〕

[1] http://iss.jaxa.jp/kiboexp/news/180830_colloid.html

高濃度高分子液滴中の分子拡散と異常拡散性の評価

東京農工大院物理¹ 東大院総合文化²

○春澤香苗^{1,2}、小堀雄大^{1,2}、渡邊千穂²、柳澤実穂²

【はじめに】

細胞中は、多様な生体高分子が高濃度で存在する混雑環境にある。こうした混雑環境下で、分子はブラウン運動とは異なる異常拡散を示すことが知られている。しかし、異常拡散と混雑環境との相関は未解明である。そこで私たちは、リン脂質膜で覆われた細胞と同じ pL 量の高分子液滴によって、混雑環境を表すパラメータ 1)液滴中の溶液濃度と 2)液滴サイズを用いて分子拡散を解析することで、異常拡散をもたらす要因を導くことを目的とした。

【結果と考察】

細胞内環境を表す混雑分子として、単糖類の Glucose とそれが縮合した多糖類の Dextran (分子量 150kDa) を用いた。pL 量の液滴内 (図 1a) と mL 量のバルク (図 1b) での分子拡散を比較するため、添加した蛍光分子 TAMRA の強度揺らぎを蛍光相関分光法 (FCS) により測定し、自己相関関数を得た。その結果、低濃度領域では 1-mode、高濃度領域では 2-mode であることが示唆された。また、300mg/mL の Dextran 溶液では、バルクでは 1-mode であるが、液滴中では 2-mode となることが確認された (図 2)。500mg/mL の Glucose 溶液においても同様の結果が得られた。これより、液滴中への閉じ込めが見た目の濃度を上昇させることで、バルクでは 1-mode であっても液滴中では 2-mode となった可能性が考えられる。さらに 2-mode の拡散の遅い時間スケールに対し異常拡散性を表すパラメータ α を得ると、Dextran、Glucose 溶液双方で濃度によらずバルク・液滴ともに $\alpha < 1$ となり、遅い異常拡散 (異常劣拡散) であることが明らかになった。また、拡散の速さを比較するため、ブラウン運動 ($\alpha = 1$) を仮定して拡散係数 D を導いた結果、高濃度 Dextran 溶液を内包した半径約 20 μm 以下の小さな液滴では、バルクや大きな液滴よりも D の低下が確認された。一方、Glucose 溶液では、液滴とバルク間には大きな D 値の違いは見られなかった。

本発表では、Dextran と Glucose の違いおよび、閉じ込めによる遅い拡散について、親水性である膜と高分子が水を取り合い、高分子間の引力相互作用がより大きくなることで、見た目の濃度が上昇し、mode 転移が起こる可能性について議論したい。

【参考文献】

- (1) A. Ochab-Marcinek et al., *Soft Matter*, 2011, 7:7366.
- (2) Y. Wong et al., *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 92:17.

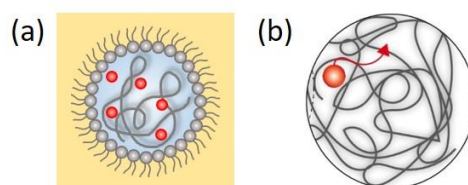


図 1 : (a)液滴中の Dextran 溶液と(b)バルクの Dextran 溶液中の分子拡散を示す模式図

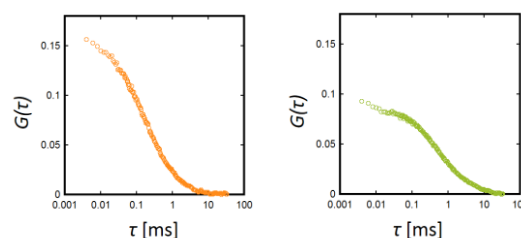


図 2 : 300mg/mL Dextran に対するバルク中 (左) と液滴中 (右) での自己相関関数

溶媒表面に束縛された液晶滴の自走運動

(立命館大理工) 遠山 諒、吉岡 潤、深尾 浩次

【はじめに】 自己推進のメカニズム、もしくはそれに類似した特性を持つ物体はアクティブマターと呼ばれ、生物、非生物を問わず理論、実験双方の観点から、近年精力的に研究されている。非生物系に見られるアクティブマターの代表例として、界面活性剤水溶液中に分散した油滴の自走運動が挙げられるが、この運動は、液滴の溶解過程において内部に発生するマランゴニ対流に起因すると考えられている。ここで、液体ではなく液晶を用いて滴を作成した場合（液晶滴）、内部配向と上記対流の相互作用によって自走運動のモードが変化することが期待され、実際に液晶滴を用いるとランダム、直線、円およびらせん運動といった多様な運動のモードが駆動されることが報告されている[1]-[3]。しかしながら、溶液内を3次元的に運動する液晶滴の内部構造を解析し、自走運動のモード変化と対応させることは、とても困難である。そこで、本研究では、溶媒の表面上において液晶滴を作成し、滴を2次元面内に束縛することで構造解析が比較的容易な系を構成し、内部配向と運動のモードを対応させることを試みた。

【結果と考察】

液晶滴はネマチック(N)相を示す4-Cyano-4'-heptylbiphenyl(7CB)を用いて作成し、溶媒は7CBが溶解するフッ素鎖系オリゴマーPF656(Omnova社)を使用した。ホールスライドガラス上に展開したPF656の表面に液晶滴を滴下し、その自走運動を偏光顕微鏡を用いて観察した。その結果、図1に示すように、溶解によって液晶滴の直径が小さくなるにつれて滴内部の組織が変化し、状態A→B→Cと内部構造が転移することが示唆された。状態Aにおいては、自走運動は円を描く軌道を示した。実際に、液晶滴の進行方向の時間発展を解析したところ、図2に示すように常に一定の変化率で進行方向が回転することが判明した（進行の角速度が一定）。一方、状態Bにおいては進行が不規則になり、状態Cに至ると速度が1桁～2桁ほど減少し、運動性が著しく低下することが判明した。発表では、内部配向が転移するときの直径や液晶滴の速度についても詳細に議論する予定である。

【参考文献】

- [1] C. Krüger, G. Klös, C. Bahr, and C. C. Maass, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 048003 (2016)
- [2] T. Yamamoto and M. Sano, *Soft Matter* **13**, 3328 (2017)
- [3] M. Suga, S. Suda, M. Ichikawa and Y. Kimura, *Phys. Rev. E* **97**, 062703 (2018)

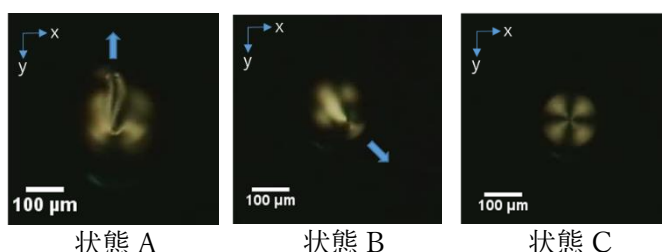


図1: 液晶滴の内部配向の変化(矢印は進行方向)

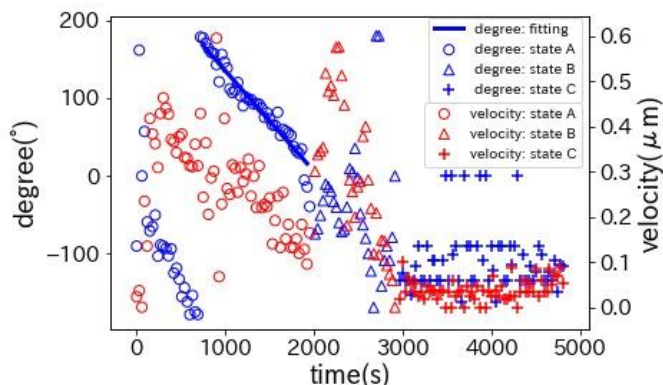


図2: x軸と液晶滴の進行方向のなす角と液晶滴の速度

擬二次元系における液中液滴の融合Ⅱ

(お茶の水女子大学物理) 古賀由希菜マーガレット, 奥村剛

【はじめに】

制限された空間内での滴の挙動を理解することは、lab-on-a-chip の操作やインクジェットプリンタ技術など工学的な技術の発展において必須のものとなっている。このように制限された空間内で液滴に働く粘抗力を理解するために、近年ヘレショウセルと呼ばれる厚み方向が数 mm の水槽を用いた研究が盛んになっている。粘性液体中での液滴の融合[1,2]や、バブルの上昇[3,4]、破裂[5]などがその例である。

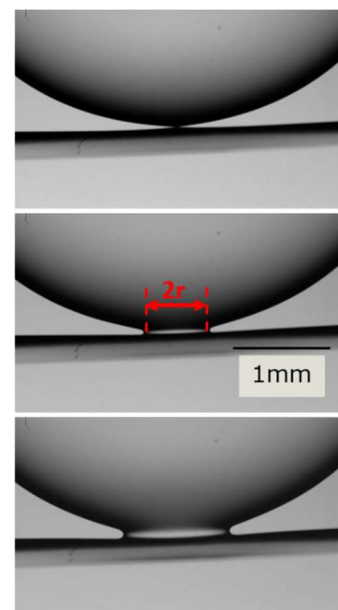
【結果と考察】

本研究ではヘレショウセル中での液滴の液槽への融合という現象を扱う。具体的には、上部に粘度の高い PDMS というシリコンオイル(粘度 10000cSt)を、下部に粘度の低いグリセリン(粘度 20~300cSt 程度)を満たしたヘレショウセル内で、グリセリンの液滴がグリセリン液槽に融合する瞬間を、高速カメラと顕微鏡レンズを用いて観察する(図参照)。前回の発表で、「融合時のネックの半径 $r < \text{セルの厚み } D$ 」の範囲では、ネックの成長速度がグリセリンの粘度に依らないということを発表した。これは、ネックが三次元的な構造をしている範囲であるにも関わらず、同条件下の二次元系での実験[6]とは異なる結果である。

これを踏まえ、今回は、ネックの成長速度を決めるパラメータを特定するため、外部液体である PDMS の粘度や、グリセリン液滴の密度、PDMS-グリセリン間の界面張力といったパラメータを変化させた実験を行った。また、今までに発生していた、液滴がセルの壁面に張り付いてしまうという問題や、融合する瞬間の型が安定しないといった問題を改善するために実験装置の改良も加えている。その結果について報告する。

【参考文献】

- [1] A. Eri and K. Okumura, Phys. Rev. E Rapid Communication, 82, 030601 (2010)
- [2] M. Yokota and K. Okumura, J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) SA015.
- [3] M. Yahashi, N. Kimoto and K. Okumura, Sci. Rep. 6, 31395 (2016)
- [4] L. Keiser, K. Jaafar, J. Bico and E. Reyssat, J. Fluid Mech, (2018)
- [5] M. Murano and K. Okumura, Phys. Rev. Fluids 3, 031601(R) (2018)
- [6] Paulsen J. D. , R. Carmigniani, A. Kannan, J. C. Burton, S. R. Nagel, Nat. Commun. (2014)



図：液中液滴の融合
液滴・液槽間に形成されたネックが成長する様子。

高分子溶液の粘弾性相分離における構造形成過程

(京大院理) 林 佑炫, 荒木 武昭

【はじめに】

高分子溶液やコロイド分散系などの複雑流体は通常とは異なる相分離現象を示すことが知られている。その起源は成分間の動的性質の大きな非対称性によるものと考えられ、粘弾性相分離と呼ばれる[1]。本研究では、高分子溶液の粘弾性相分離におけるネットワーク構造やドロップレット構造の形成やその粗大化過程などを調べた。

分子シミュレーション(MD)における分子モデルは Beads-Spring model (Kremer-Grest model)を用いた。重合度: 200, チェーンの数: 200, モノマー数密度: 0.05 ~ 0.20 とし、溶媒粒子を含む全粒子数密度は 0.8 とした。相分離の開始は同成分間に Lennard-Jones ポテンシャルの引力を導入することで行った。

【結果と考察】

図 1. (a)は相分離シミュレーションのスナップショットである。 $\rho = 0.20$ の系においては、高分子鎖の絡み合いによる複雑なネットワーク構造が確認され、 $\rho = 0.05$ の場合、絡み合いが少なく、単独または数個の高分子によるドロップレットが形成した。(b)は高分子間の接触を調べ、相分離開始直後に接触が離れたペアの linking number の分布を示したものである。

Linking number は $L_k = \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} (d\mathbf{r}_1 \times d\mathbf{r}_2)$ で表され、2 つの閉曲線の巻かれた回

数を表すトポロジ不変量である。高分子鎖のような開曲線の場合は、絡み合いの度合いを表す連続的な値となる。ほとんどが $L_k < 0.3$ であり、相分離開始直後に弱い絡み合いのペアの接触が離れていると言える。(c)は高分子の平均慣性半径の時間変化である。相分離開始後、各々の高分子鎖は intra-chain での相互作用により縮まろうとするが、大きく引き伸ばされる高分子鎖が現れ、平均に影響を与えている。伸びた高分子鎖の両端に、強い絡み合いなどといった inter-chain 間の効果が作用していると考えられる。

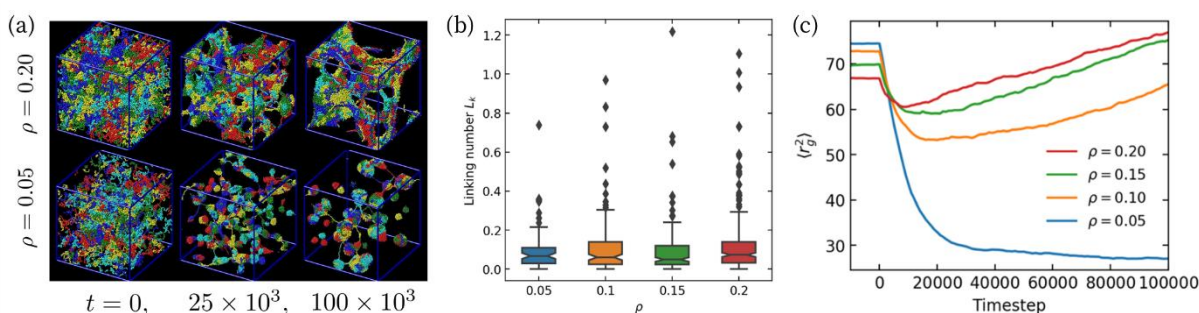


図 1. (a) 相分離の進行過程。(b) $t = 0$ 付近で接触が離れた高分子ペアの linking number の分布。(c) 平均慣性半径の時間変化。

【参考文献】

[1] H. Tanaka, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **12**, R207 (2000).

ソフトな分子の混合系における Soret 効果

(京大院理) 荒木 武昭, 近清 なつみ

【はじめに】多成分からなる混合流体に温度勾配をかけると、温度勾配に比例して成分間の濃度差の勾配が生じることが知られており、Soret 効果と呼ばれている。数多くの研究が報告されているものの、非平衡現象の難しさから Soret 効果の物理的起源の全容についてはまだ解明されていない。Soret 効果の特徴付ける指標として Soret 係数がある。Soret 係数は、成分間の分子間力相互作用・混合比・系の平均温度などに依存し、その振る舞いを化学ポテンシャルを用いた熱力学的な議論により説明する試みが古くからなされてきた。一方、熱力学的な議論では説明できない振る舞いも観測されることが知られている。例えば、質量のみ異なる二種の分子の混合系でもより質量の重い成分が低温側に集まり、これは Isotope 効果と呼ばれている。本研究では、これまで考慮されていなかった分子内の自由度が Soret 効果にどのように寄与するかについて考える。

【結果と考察】内部自由度を有する最も簡単な系として、Lennard-Jones ポテンシャルの斥力部分で相互作用する球「モノマー」と、バネポテンシャルでモノマー2つを結合した「ダイマー」からなる2成分系を、非平衡分子動力学シミュレーションを用いて調べた。(図1(a))バネポテンシャルの寄与が十分に大きい場合には、ダイマーをモノマーに対して2倍の質量を持つダンベル状の物体とみなすことができ、Soret 効果が表れることを期待した。また一方、バネポテンシャルの寄与が十分に小さく、この系をモノマー1成分系として見なすことができる場合には、Soret 効果が起こらなくなると予想される。

各系の Soret 係数を算出し、そのバネ係数依存性や、系の体積密度、系の平均温度への依存性を調べた。系の体積密度が低い場合には、予想通りバネ定数の値が大きい場合小さい場合どちらでもダイマーが低温側へ移動する。系の体積密度が高くなると、ダイマーが低温熱浴側へ移動する様子が観測された。バネ係数が小さい程、その振る舞いは顕著であり、Soret 係数の符号の逆転も観測される。(図1(b))我々はこの奇異な振る舞いは、粒子の実効的な跳ね返し係数の粒子間における非対称性に起因すると考えている。

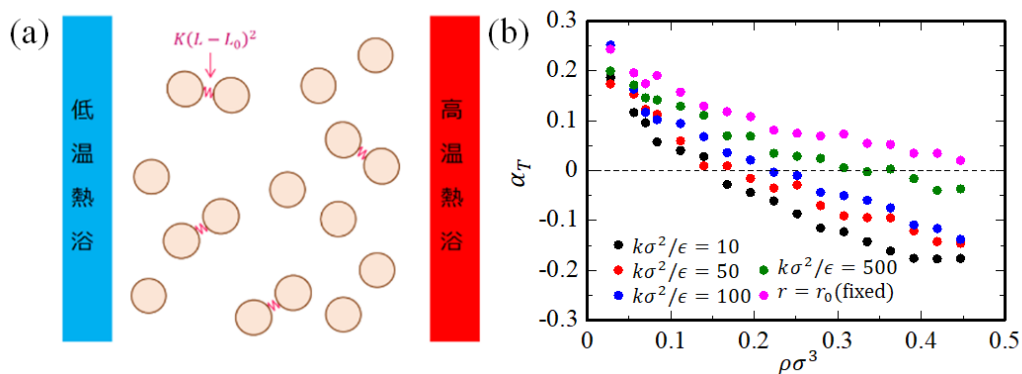


図1 (a) 温度勾配下におけるモノマー・ダイマー混合系の模式図。

(b) Soret 係数 α_T の粒子密度 ρ 依存性。バネ係数 k を変化させた。

α_T の値が正の場合には、ダイマーが低温側に集まる。

環状ブロックコポリマーのマイクロ相分離:トポロジーの効果

(青山学院大学 理工学部) 磯尚樹, 齋藤拓也, 坂上貴洋

【はじめに】

ブロックコポリマーでは異なる種類のモノマーが化学的に結合しており、相分離はナノメートルスケールの秩序構造を形成する。このような相分離をマイクロ相分離という。マイクロ相分離がおこる転移点は、乱雑位相近似を用いた理論により Leibler によって計算されている⁽¹⁾。また Marko は Leibler の理論を環状鎖に適用し、環状ブロックコポリマーのマイクロ相分離の解析を行った⁽²⁾。

Marko の理論では環状鎖のコンフォメーション分布としてガウス鎖分布が仮定されている。ところが、実際の環状鎖ではトポロジーの効果によって濃厚系においてガウス鎖とは異なるコンフォメーション分布を持つ⁽³⁾。そのため現実の環状ブロックコポリマーのマイクロ相分離では Marko の理論予測と異なる結果が期待される。

【結果と考察】

本研究では次の 2 種類「(i)トポロジーの拘束がなし」「(ii)トポロジーの拘束があり」の環状鎖のシミュレーションを行い、それぞれの場合について乱雑位相近似の計算に必要な鎖の相関関数を計算した。(ii)については異なる鎖間がリンクしないような状態(non-concatenation)を考えた。また、これらの相関関数より転移点 χ^*N を計算した。ここで $N=256$ はモノマー数である。その結果(ii)の転移点に対する χ^*N の方が(i)に比べて大きい値になった。これはトポロジカルな拘束により相分離点は低温側にシフトすることを意味する。

ただし、現在の鎖長($N=256$)では2つ χ^*N の差は小さく、この結果は2つの構造因子の差異が小さいこととも矛盾しない。差が小さい原因として、モノマー数の 256 という値がちょうどトポロジーの効果が見え始めるくらいの値であることに起因していると考えられる。そのため、よりトポロジーの効果がはっきりと現れてくるようなモノマー数の大きい環状高分子で、同様の解析を行う予定である。この結果は現在得られている排除体積鎖の χ^*N より大きい値が得られると考えられる。

【参考文献】

- (1)L.Leibler, *Macromolecules* **13**, 1602 (1980)
- (2)J.F. Marko, *Macromolecules* **26**, 1442 (1993)
- (3)T. Sakaue, *Phys.Rev.Lett* **106**, 167802 (2011); *Soft Matter* **14**, 7507 (2018)

リン脂質とアクチンとビーズの互いに結合しないもの同士の協働によるリポソームの形態形成

(名古屋大・院理・生命) 児島 涼太、田中 駿介、瀧口 金吾[○]

(東京理科大・理・応用物理) 渋谷 朋、住野 豊

(法政大・生命科学・生命機能) 林 真人

【はじめに】

細胞の形態形成や運動を司る機構を構成論的アプローチに従って理解するためにアクチン線維 (F-actin) を封入した巨大リポソームが構築されている。最近、リポソーム内に封入された F-actin の濃度が生細胞の細胞質における濃度に匹敵する場合、アクチン線維の架橋因子や分子モーターであるミオシンが共存していなくても、F-actin のみによって、リポソームを紡錘形に変形できることを示した [1]。さらに紡錘形に変形したリポソーム内の F-actin の動態を観察した結果、F-actin のネマチック液晶形成が重要であることが示された。

そこで本実験では、F-actin のネマチック相の形成に対する障害物として、ポリスチレンビーズを共封入し、リポソームの形態形成に及ぼす効果を観察した。

【結果と考察】

ビーズを夾雑物として共封入しても、F-actin の濃度が高過ぎる場合 ($\sim 100 \mu\text{M}$) には、リポソームは紡錘形にしか変形しなかった。逆に、F-actin の濃度が低過ぎる場合 ($\leq 30 \mu\text{M}$) には、その形態はビーズのみを封入した場合と変わらず、球形のままの物が殆どだった。

しかし、バルクの溶液中でアクチン線維がネマティック液晶を形成するとされている濃度 [2]、即ちそれはリポソームを紡錘形に変形させるために必要な F-actin の封入濃度と同じであったが [1]、その閾値 ($\sim 50 \mu\text{M}$) の近傍の F-actin 濃度では、紡錘形以外の変形、オカリナ型、涙滴型、楕円球型等、も観察される様になった (図)。

得られた結果は、アクチンとの特異な結合や相互作用を持たないビーズであっても、共封入された場合には F-actin と協力してリポソームの形態に影響を与えることができることを示している。

Liposome containing
F-actin and beads
(Dark-field)



Phospholipid: DOPC
Bead: x 1/33 diluted (Life Technologies, T7284 0.5 or 4.0 μm)
Actin concentration: 50 μM

10 μm

【参考文献】

- (1) Tanaka S, Takiguchi K, Hayashi M.

Repetitive stretching of giant liposomes utilizing the nematic alignment of confined actin. *Comm. Phys.* **1**, 18 (2018).

- (2) Viamontes J, Oakes PW, Tang JX. Isotropic to nematic liquid crystalline phase transition of F-actin varies from continuous to first order. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 118103 (2006).

三価イオンによる膜張力制御が誘起するベシクルの接着・融合

(東北大理) 佐久間 由香

【はじめに】

生命の基本機能であるサイトーシス経路では細胞膜の一部が物質を取り込みながら陥入し、分裂して小胞を形成する。その小胞が別の細胞器官の膜と接着、融合をすることで外部からの物質を目的の器官に運搬している。このように生命機能には膜変形が密接に関係している。特に、サイトーシス経路に伴う膜変形はタンパク質やペプチドが膜に作用することで膜の曲率や張力といった物理パラメータを変化させ、膜変形を実現していると言われている。近年、フランスの Angelova のグループがマイクロインジェクションという手法によって脂質ベシクルに化学刺激を与えると、膜が部分的に陥入または突出するという現象を報告している[1, 2]。この報告は、与える化学刺激の種類と脂質の組み合わせによって膜の変形の方法を制御できる可能性があることを示唆している。そこで、本研究ではマイクロインジェクション法を用いた化学刺激によってアニオン性脂質を含む膜の物理パラメータを制御し、サイトーシス経路に伴う膜変形の再現を試みた。

【結果と考察】

中性脂質 DOPC とアニオン性脂質(DOPG または DOPS)から成る二成分ベシクルに 1, 2 価のイオンをインジェクションすると、ベシクルがピペットの方向に伸びる膜の突出現象が観察された。一方、3 価のイオンをアニオン性脂質を含む二成分ベシクルに与えると、そのイオン濃度が 0.04mM 程度ではベシクルの接着、0.06mM 程度では融合を観察することができた。これらの現象について、脂質と化学物質の相互作用に由来する膜間相互作用（ファンデルワールス引力、静電斥力、膜の熱揺らぎに由来する立体斥力）と膜張力の変化の観点から考察した結果を報告する。

【参考文献】

- (1) N. Khalifat, *et al.* *Biophysical Journal* **95**, 10, 4924-4933 (2008)
- (2) J.-B. Fournier *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 018102 (2009)

乱雑な原始環境下でのベシクル成長

(東北大院理) 馬場 晶子, 今井 正幸

(ルンド大物理化学) Ulf Olsson

【はじめに】

原始地球上では、様々な分子の化学反応・自己集合化が進み、『生命』という形が生まれていったと考えられている。その中でも、両親媒性分子が球殻状に自己集合化したベシクルと呼ばれる細胞膜の前駆構造体が成長・分裂する現象は生命の増殖と結びつく重要なステップである。しかしながら通常、ベシクルは水中で安定であり、その成長や分裂は自発的には起こらない。したがって、ベシクルの成長・分裂が引き起こされる条件を明らかにすることは原始環境下での生命の起源を考える上で非常に重要である。本研究では原始環境下で存在したと考えられている脂肪酸を用いてベシクルを作成し、様々な環境下でベシクルのサイズの変化を調べることで、ベシクル成長のための条件を明らかにすることを目的とする。

【結果と考察】

ベシクルの成長には、外部に存在する膜分子（ないしは膜分子前駆体）がベシクル膜に取り込まれることにより安定化するような化学ポテンシャルの差が存在することが必要となる。我々はまず、脂肪酸分子の解離度を pH により変調させることにより、この化学ポテンシャルの差を生じさせ、ベシクルの成長が実現できるかを実験で確認した。試料に用いた脂肪酸はデカン酸である。デカン酸は pH によりカルボキシル基に水素が結合した中性の状態と解離したイオンの状態を制御でき、ベシクルはほぼ半分が解離した pH が 7 付近で形成される。pH が高い 9.5 ぐらいになるとカルボン酸はほぼ 100% し、デカノエートはミセルを形成する。そこで、pH 7 付近のベシクル懸濁液に pH 9.5 付近のデカノエートミセルを少量加えると、pH 変化によりミセルは不安定になり、すでに形成しているベシクルに取り込まれることになる。我々はこの予想に基づき、ベシクル懸濁液に pH 9.5 付近のデカノエートミセルをゆっくりと 2 時間かけて加えた。そのサンプルを DLS 法(光散乱法)で計測し、キュムラント解析でベシクルサイズを求めた。

結果、加える前のデカン酸ベシクルの流体力学的半径は 60 nm であったが、デカノエートミセルの添加によりそのサイズは、数時間後には 70 nm まで急激に増大したのち、成長速度は鈍化し、2 日後には 80 nm となり、サイズ変化は一定に落ち着いた。一方、ミセルを加えない場合には、数時間後には 60 nm とサイズに変化はなく、2 日後には 70 nm であった。このことより、ミセルを構成したデカノエートがベシクル膜に取り込まれ、ベシクルの成長が観察されたと考えている。この取り込み速度は、ミセルの pH やプレバイオティックな化学物質(イオン、アミノ酸、ペプチド、核酸など)によって変化する値であると推測されるため、各条件での取り込み速度を求め、比較していく。本発表では、現在までに構築した実験系およびプレバイオティックな化学物質のベシクル成長への影響について報告する。

【参考文献】

- (1) I. A. Chen and J. W. Szostak., *Biophys. J.*, 87, 988-998 (2004).
- (2) M. M. Hanczyc, et al., *Science*, 302, 618-622 (2003).

リポソームの膜組成と再構築された膜タンパク質量の相関

東京農工大院物理¹, 東大院総合文化², 慶大理工³

小林瑞輝^{1,2}, 藤原慶³, 柳澤実穂²

【はじめに】

脂質二分子膜を基本構造とする生体膜は、総重量の約半分を膜タンパク質が占めている。それゆえ、機能を担う膜タンパク質の研究においては、従来の一分子レベルだけでなく、複数の膜タンパク質が高密度に存在する混雑環境下での機能解析も必要不可欠である。しかし、実際の細胞膜並みに膜タンパク質を再構築させた細胞膜モデルの研究は報告されていない。この理由として、脂質に比べて遥かに大きな膜タンパク質を多量に膜挿入すると、膜が不安定化してしまうことが挙げられる。そこで本研究では、細胞膜モデルとして汎用されてきたリン脂質膜小胞（リポソーム）を用い、膜物性と膜内相分離を利用して、膜タンパク質を高密度に再構築する手法の確立を目指した。

【結果と考察】

膜タンパク質として、構造安定性が高い α ヘモリン(α HL)を用い、可視化のために緑色蛍光タンパク質 GFP でラベルした。この α HL 溶液をリポソーム溶液へ添加すると、疎水性相互作用により自発的に膜挿入されることが知られている。本研究では、リポソームの膜組成を変化させるため、2 種類のリン脂質：不飽和リン脂質(DOPC)と飽和リン脂質(DPPC)を用いた。これら 2 種類のリン脂質にコレステロール(Chol)を添加した 3 成分リポソームは、室温で 2 相分離し、DOPC に富む無秩序相と DPPC に富む秩序相に分離する [1]。この 2 相分離系に α HL を添加すると、DOPC に富む無秩序相へ局在する様子が確認できた(図 1)。次に、異なる膜組成からなるリポソームに対し、膜挿入された α HL 量を定量解析

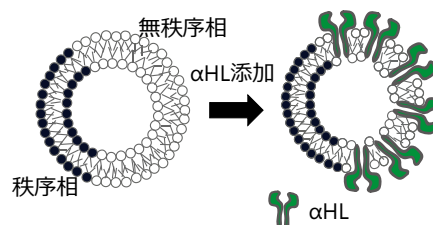


図 1: リポソームへ α HL の添加

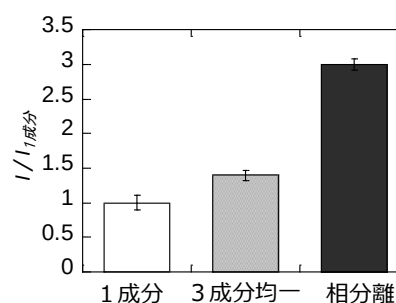


図 2: GFP 由来の膜の蛍光強度の比較

するため、共焦点画像を取得することで GFP 由来の蛍光強度を調べた (図 2)。3 種類のリポソーム：DOPC のみの 1 相系、3 成分からなる 1 相系、3 成分からなる 2 相分離系に添加した結果、2 相分離系で最密度化されることが分かった。相分離した平面膜の場合、 α HL は相界面から挿入されることが報告されており[2]、再構築される α HL 量の上限は膜面での混雑度よりも膜挿入のしやすさが支配的となる可能性が高い。次に、相分離したリポソームに浸透圧印加することで、 α HL に富む無秩序相を内側に小胞化させて α HL の密度を上昇させる試みを行った。実際に、膜変形による α HL の高密度化には成功したが、膜挿入された α HL 量がある閾値を超えると膜変形する前に崩壊してしまう様子が確認された。今後は、膜崩壊を招く α HL 量の上限値を見出すことで、膜タンパク質の高密度化の手法を確立したい。

【参考文献】

- (1) M. Yanagisawa, et al., 2008, *Phys. Rev. Lett.*, 100:148102.
- (2) S. M. Maté, et al., 2014, *Biochim. Biophys. Acta*, 1838:1832-1841.

脂質分子のフリップフロップとベシクル分裂

(¹山口大学院創成科学、²東北大院理) ¹浦上直人、²佐久間由香、²今井正幸

【はじめに】

細胞分裂は生命の基本的要素の一つである。細胞が分裂する際、様々なタンパク質が作用していることが分かっている。しかしながら、近年、細胞壁を持たない L 型菌は、そのようなタンパク質が無くても分裂し、増殖することが報告されている(1)。また、タンパク質を含まない純粋なベシクル系における実験でも、シリンダー型と逆コーン型で構成された 2 成分ベシクルの分裂する様子が観察(2)されている。これらの実験結果から細胞分裂はタンパク質の働きによる複雑な現象では無く、膜の弾性エネルギー等で決まる単純な物理現象として扱うことが可能であると考えられる。そこで本研究では、粗視化モデルを用いた分子動力学シミュレーションにより、ベシクル分裂のメカニズムの詳細を明らかにすることを目的とする。今回は、脂質分子を粗視化した幾つかのモデルを用い、脂質分子のフリップフロップとベシクル分裂の関係を報告する予定である。

【結果と考察】

粗視化した脂質分子モデル 6,500 本を用いてベシクルを構成し、シミュレーションを行った。2 分子膜の内側と外側を構成する脂質分子数の本数差は $\Delta N = 2,382$ ($\Delta a_0 = 1.61$)、ベシクル内の水分子数は $N_w = 13,376$ ($v = 0.77$) とし、洋ナシ型ベシクルを初期状態とした。ベシクルの形状変化を Fig. 1(a)に示す。ベシクルの形状は、洋ナシ型から limiting shape に変化し、最終的にはストークがちぎれ、分裂する様子が分かる。この時の ΔN 、 N_w 、 $\Delta\phi$ に対する時間変化を Fig. 1(b)に示す。ここで、 $\Delta\phi$ は 2 分子膜外側と内側における逆コーン型脂質の割合の差である。シミュレーション開始直後に若干の変化が見られるが、その後は一定の値となっており、シミュレーション中に水分子の浸み出しやフリップフロップが起っていないことが分かる。ベシクル分裂において、脂質分子がフリップフロップしないことは重要である。このことを示すために、脂質モデルをフリップフロップしやすいものに変更し、シミュレーションを行った。この結果も含め、当日詳細を発表する予定である。

【参考文献】

- (1) M. Leaver, et al., Nature, 457 (2009) 849
- (2) Y. Sakuma, et al., Phys. Rev. Lett., 107 (2011) 198101.

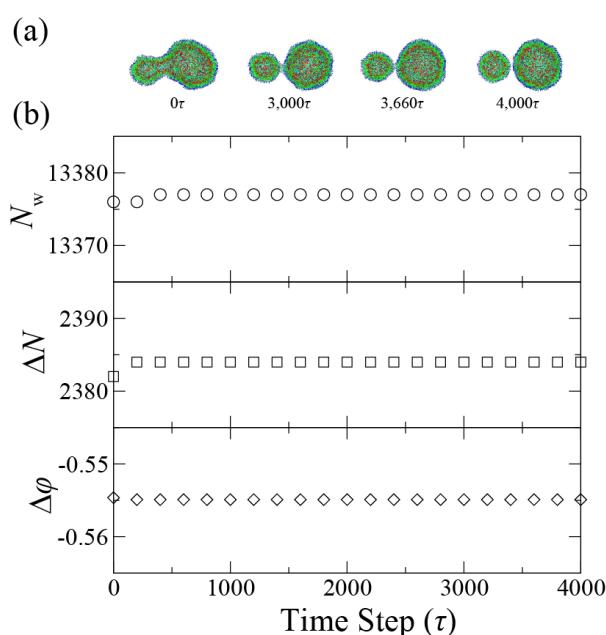


Fig. 1 (a)洋ナシ型から分裂までのベシクルの形状変化過程。(b)ベシクル内の水分子数(N_w)、2 分子膜内外の脂質分子数差(ΔN)、2 分子膜内外の逆コーン型脂質分子の割合($\Delta\phi$)。

再帰的に自己増殖するコアセルベート液滴の創製

(1.生命創成探究センター 2.東大院総合 3.分子研) ○松尾 宗征^{1,2}・栗原 顕輔^{1,3}

【はじめに】 原始地球において、ペプチドを主成分とした液滴（コアセルベート液滴）が液-液相分離により形成され、その液滴が自己増殖するに至り、最初の生命体になったとするオパーリンのコアセルベート仮説が広く知られている¹。実際に、熱重合で生成したペプチドは液滴を形成することができる²。しかし、形成されたコアセルベート液滴がどのように自己増殖能をもつに至ったのか、その経緯は未解明であった。ペプチドと液滴の形成条件が大きく異なり、液滴形成条件下で液滴自体が自身の構成要素であるペプチドを再生産できなかったことがその原因である。そこで本研究では、水中で自発的にモノマーが重合しペプチドが生成される反応系を構築することで、自己増殖するコアセルベート液滴の構築を試みた。

【結果と考察】 我々は、超分子化学の視座に根差した有機合成化学的手法により、以下の3つの課題を同時に解決する、自己増殖するコアセルベート液滴の創製を実現した。

① 水中での自発的ペプチド生成

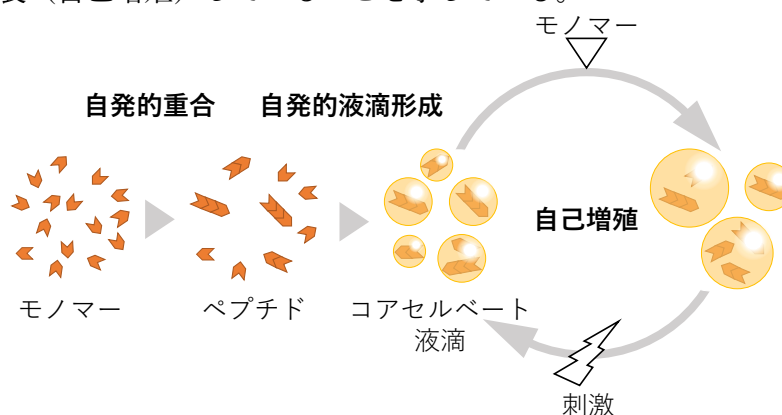
Native chemical ligationの反応機構³から、N末端にシステイン、C末端にチオエステルの2つの反応部位をもつアミノ酸誘導体（モノマー）を合成することで、そのモノマーを水中で自発的に重合させ、ペプチドを生成させる反応系を着想した。モノマーどうしをジスルフィドで架橋したモノマー前駆体（ M_{pre} ）を還元剤とともに水中に添加することで、水中でオリゴペプチドが自発的に生成されることを、NMR測定と質量分析の結果から明らかにした。

② 生成されたペプチドによる液滴形成

生物の細胞内でも、カチオン- π や π - π 相互作用、静電相互作用で液-液相分離液滴が形成されることが、最近の研究で明らかになってきている⁴。そこで、モノマーの末端アミンをアンモニウムカチオンに、他方の末端をベンジルチオエステルにすることで、液滴形成を志向した。水中に M_{pre} と還元剤を添加したところ、溶液が徐々に白濁し、顕微鏡観測でマイクロメートルサイズの分子集合体形成が見出された。分子集合体は球状で、隣接する分子集合体どうしは自発的に融合可能であった。さらに、生成されたオリゴペプチドと重合反応で脱離したベンジメルカプタンの双方が、液滴形成には必要な構成成分であった。これらの結果は、形成された分子集合体が相分離により形成されたコアセルベート液滴あることを意味している。

③ コアセルベート液滴の自己増殖

液滴の自己増殖能を検証するため、液滴に M_{pre} と還元剤を再び添加した際の粒径変化を動的光散乱で追跡したところ、元の液滴の分布以外に新しい分布は形成されず、既存の液滴が肥大し、添加直後に著しく肥大化することがわかった。NMRスペクトルによる反応追跡からは、重合による1級アンモニウムカチオンの消失が自触媒的であることが明らかになった。さらに、20時間毎に継続的に M_{pre} と還元剤、物理刺激を与えると、液滴の粒径が再帰的に変動した。これらの結果は、形成されたコアセルベート液滴が水中で物理的自触媒機構⁵により、自己再生産しながら分裂（自己増殖）していることを示している。



【参考文献】 (1) Oparin, A.I. *Origin of Life*. Macmillan, New York (1938). (2) Fox, S.W. *et al. Science* **128**, 1214 (1958). (3) Dawson, P.E. *Science* **266**, 776 (1994). (4) Dolgin, E. *Nature* **555**, 300 (2018). (5) Matsuo, M. *et al. Chem. Phys. Lipids* **222**, 1 (2019).

アクトミオシンで構成された細胞サイズアクティブマテリアル

(京大院理, 北大電子研^A) 幕田 将宏, 西上 幸範^A, 市川 正敏

【はじめに】

細胞の能動的な力生成は、細胞骨格の一つであるアクチンと、モーター蛋白質のミオシンによる ATP の化学エネルギーを機械的エネルギーに変換によって発生され、これは細胞形状の変形と維持に主要な役割を果たしている。

我々はアクトミオシンによって引き起こされる細胞変形の物性的側面に興味をもち、脂質膜に囲まれた油中液滴を用いたモデル再構成系で *in vitro* 実験を行った[1, 2]. これによりアクトミオシンによって誘起される能動的な界面変形とその統計的な特徴が明らかになったが、界面変形とモデル系内部のアクトミオシンの高次構造形成のダイナミクスとの相関、バルクのアクトミオシンで見られるアクティブな現象との関連にはいまだ未解明な点が多く残されている。

【結果と考察】

本研究では細胞サイズのアクトミオシン液滴内部に導入したマイクロビーズの運動の観察を行い、界面運動との相関と閉じ込めの効果の測定を試みた。脂質界面の基本的な振る舞いは先行研究の結果と定性的に一致し、界面の変形モードとマイクロビーズの変動は相関を示した[3]. また、界面の明確な変形開始前に、既にマイクロビーズは異方的な揺らぎが見られ、液滴球の動径方向と接線方向の拡散には有意な差が見られた。これらの結果は、小さな球形境界条件下でのアクトミオシン束の異方性形成過程、およびそれらの力ネットワークを反映していると考えられる。本講演では細胞程度の大きさの空間に閉じ込められたアクティブな性質を持つアクトミオシンによって誘起される微小粒子の運動変化、及び液滴球同士の相互作用について報告する。

【参考文献】

- (1) H. Ito, Y. Nishigami, S. Sonobe, M. Ichikawa, Phys. Rev. E 92, 062711 (2015).
- (2) Y. Nishigami, H. Ito, S. Sonobe, M. Ichikawa, Sci. Rep. 6, 18964 (2016).
- (3) H. Ito, M. Makuta, Y. Nishigami, M. Ichikawa, J. Phys. Soc. Jpn 86 (2017).

高分子混雑した人工細胞中での分子拡散

(農工大物理¹ 産総研・バイオメディカル² 北大先端生命³ 東大総合文化⁴)

○小堀雄大^{1,4}、渡邊千穂⁴、山本条太郎²、金城政孝³、柳澤実穂⁴

【はじめに】

マイクロメートルサイズの細胞中には、高濃度の生体高分子溶液が存在している。こうした高分子混雑環境を人工細胞により再現することで、内包高分子の挙動に対する細胞サイズ閉じ込めの影響が解析されてきた。例えば、生体高分子のゾルゲル相転移やタンパク質発現効率が細胞サイズ閉じ込めにより変化することが報告されている(1, 2)。また我々は最近、球状タンパク質である bovine serum albumin (BSA) と線状合成高分子である polyethylene glycol (PEG) の混合溶液が、mL 量以上のバルク系では均一相を示すにもかかわらず、fL 量の人工細胞中への閉じ込めにより相分離することを見出した(3)。しかし、これら細胞サイズ閉じ込め効果をもたらす物理的要因は未解明である。そこで本研究では、1 成分の高分子水溶液を異なるサイズと形の人工細胞に閉じ込め(3)、微小体積効果を表す体積 V や膜の影響を表す膜面積・体積比 S/V 、膜からの距離 L_m をパラメーターに分子拡散を解析した。これにより、分子拡散に対し細胞サイズ閉じ込めをもたらす最も支配的なパラメーターを導くことを目的とした。

【結果と考察】

電氣的に中性の脂質で覆われた油中液滴を人工細胞として用い、高濃度 BSA 溶液中の蛍光分子 (green fluorescent protein, GFP) の拡散係数を測定した。まず、球状液滴において液滴サイズの影響を調査した結果、液滴の半径 R が $20\ \mu\text{m}$ 以下で拡散係数が低下することを見出した。このとき、遅い拡散は液滴の膜からの距離 L_m には依存しなかった。また、線状高分子である PEG 溶液中で蛍光分子 Rhodamine 6G を用いて同様の実験においても同程度の液滴サイズ依存的な遅い拡散が見られた。これらの結果は、マイクロ閉じ込めがナノサイズの分子拡散を遅くすること、膜からの距離に依存せず液滴内全体で分子拡散が遅くなることを示している。次に、この拡散係数低下が閉じ込めによる微小体積効果 V 、表面積/体積比 S/V のどちらが支配的かを調べるため、円盤状の液滴内で分子拡散を測定した。円盤状の液滴を用いることで、 V を一定で S/V を増加させることが出来る。その結果、円盤の液滴中では、球形液滴では拡散係数が低下しない体積条件下でも、BSA 系、PEG 系の両方で拡散係数が低下した。これらから、閉じ込めによる拡散係数の低下をもたらす支配的パラメーターは微小体積 V ではなく、表面積/体積比 S/V であることが導かれた。さらに本発表ではこれらの現象について、高分子のクラスター化(4)や液滴の外側を覆う脂質膜が溶液内部の水を奪うことについて議論したい。

【参考文献】

- (1) A. Sakai et al., *ACS Cent. Sci.* **4**:477-483 (2018)
- (2) A. Kato et al., *Sci. Rep.*, **2**:283 (2012)
- (3) C. Watanabe, Y. Kobori, J. Yamamoto, M. Kinjo, M. Yanagisawa, *submitted*.
- (4) S. Bülow et al., *PNAS*, **116**: 9843-9852 (2019)

遺伝子組換え技術を利用した FRAP による分子交換メカニズムの研究

(大阪大学基礎工学研究科) 齋藤匠, 松井翼, 松永大樹, 出口真次

【はじめに】

生細胞内のタンパク質は常に数秒から数分単位で入れ替わり, 細胞の恒常性維持やシグナル伝達などに深くかわる (分子交換). FRAP (fluorescence recovery after photobleaching) は代表的な分子交換計測法である. 慣例的には, 蛍光の時間的な回復曲線に対して一時遅れ系でフィットし, 時定数の逆数から回復速度を比較する. これは最も簡単に利用されているが, 細胞内の分子の挙動 (ブラウン運動, 反応や異常拡散) を考慮していない. そこで本研究では, 生化学的な技術と FRAP を組み合わせることで, これら複雑な現象を考慮した分子交換メカニズムの解明を目指す.

【結果と考察】

今回用いたトランスジェリン 2 (TAGLN2) タンパク質は, アクチン結合部位とダイマー形成部位を持つ⁽¹⁾ため, 細胞内で拡散しながら反応も行っている. TAGLN2 の DNA 配列の中の反応ドメインを遺伝子組換えにより制御した (Fig. 1A). Fig. 1B に示すように, FRAP 実験で得られる有効拡散係数 (拡散と反応を含んだ拡散係数) を各サンプルで比較すると, コントロール (FL) と ΔAB が, ΔCH を欠損したサンプルよりも有意に低下した. また, ΔCH のみを欠損したサンプルは, $\Delta AB\Delta CH$ よりも僅かに低下した. 反応ドメインの存在により TAGLN2 は反応を行うため, 有効拡散係数が低下したと考えられる. しかし, これらの結果は, 反応の影響だけでなく, タンパク質の質量変化も含んでいる. そこで, Stokes-Einstein の式を用いて, すべてのサンプルに関する純拡散係数を質量比から求めた. $\Delta AB\Delta CH$ は純拡散状態であるため, このサンプルの質量を基準質量, 有効拡散係数を基準純拡散係数とした. 純拡散係数と有効拡散係数の関係を, 平衡定数を用いた反応拡散方程式から求めた. 実験で得られる有効拡散係数と, Stokes-Einstein の式から平衡定数を求めた.

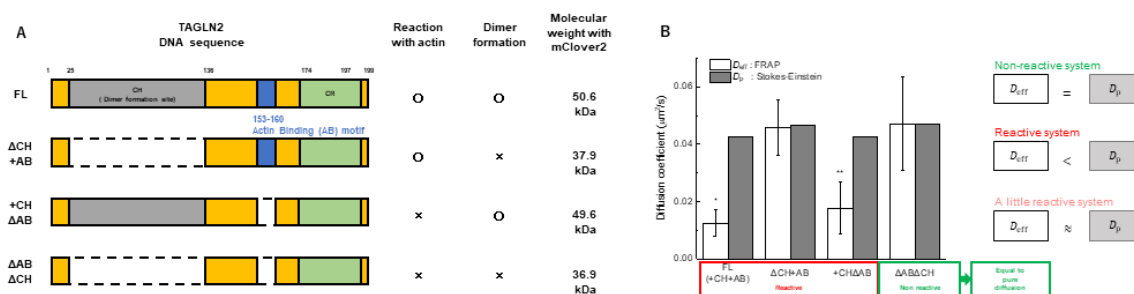


Fig. 1 A) Schematic view of DNA sequences. B) Effective diffusion coefficient and pure diffusion coefficient estimated by Stokes-Einstein equation.

【参考文献】

(1) Na, B., et al., (2015). TAGLN2 regulates T cell activation by stabilizing the actin cytoskeleton at the immunological synapse. *J Cell Biol*, 209(1), 143-162.

接着性細胞のメカノケミカルモデル

(理研 BDR) 多羅間充輔

(京大工化) 山本量一

【はじめに】

細胞は自律的に運動するアクティブマターの一つである。一般にアクティブマターは、内部で自ら力を生成することで自発運動するが、作用反作用の法則からそのような「内部力」の単純和はゼロとなる。このようなフォースフリー (force-free) の条件のもとで、正味の運動を獲得するためには、「対称性の破れ」が重要となる。このような事実は、低レイノルズ数の流体中での運動については「帆立貝の定理」として知られている。

細胞運動には大きく分けて、バクテリアのような流体中の「遊泳」と、細胞性粘菌などの接着性細胞に特徴的な基板上の「這行」とがある。流体中の遊泳に比べて、這行運動の力学的な理解は遅れている。生物の教科書的には、細胞の這行は次の4つのプロセスのサイクルによって実現すると考えられている。

- ① アクチンの重合による細胞前方の伸長 (protrusion)
- ② 前方の基盤への接着 (adhesion)
- ③ 細胞後方の基盤からの剥離 (de-adhesion)
- ④ アクトミオシンによる細胞後方の収縮 (contraction)。

それぞれの素過程は詳しく調べられてきたものの、細胞の運動に対するサイクル自身の影響は体系的に調べられていなかった。

【結果と考察】

まず、我々は、細胞の這行運動の4つの素過程のサイクルについて体系的に研究した。そのために細胞を粘弾性バネで繋がれた2つの粒子で粗視化してモデルし、バネを周期的に伸縮することで伸長と収縮の過程を、粒子の基盤との摩擦の強さを変化することで接着と剥離の過程を表す。解析計算の結果、バネの伸縮と接着の強さの間に位相差に応じて運動が変化することが明らかにした¹。

這行細胞の1次元のダンベルモデルをより実際の細胞に近づけるため、2次元に拡張した。単一の細胞を粘弾性バネで繋がれた多数の粒子で表す。ダンベルモデルのようにバネの伸長と基盤接着の強さの時間変化を「手で」調整することは現実的でない。そこで細胞内部の生化学反応の反応拡散モデルを援用する。化学物質の濃度に応じてバネの伸長と基盤との接着性を変化することで細胞が運動する。化学物質濃度のランダムネスにより、運動方向の転換のほか自転運動も実現する。構築したメカノケミカルモデルを用いて細胞が基盤に及ぼす牽引力を測ると、細胞がフォースフリーであり、かつ、自転運動しているときでもトルクフリーであることを示した²。

1. M. Tarama, and R. Yamamoto, JPSJ 87, 044803 (2018).
2. M. Tarama, K. Mori, and R. Yamamoto, arXiv:1905.03001 (2019).

卵割過程の力学モデルの構築

(東北大 理) 村上 圭・海老原隆太
佐久間由香・今井正幸
(遺伝研) 木村 暁・山本 一徳

【はじめに】

動物細胞の卵割においては、受精した卵細胞が分裂し成体に向けて細胞集団として形態を形成していく過程が観察される。その卵割においては、アクトミオシンネットワークによって生じる表皮張力（膜張力）と細胞間を接着するカドヘリンからの接着力のバランスにより、その形態を制御していると考えられている。我々はこれまでに、接着したリン脂質ベシクルを用いたモデル実験と膜弾性エネルギーに基づく3次元膜形状シミュレーションの比較から膜張力・膜弾性力・接着力が接着したベシクルダブレットの形状に及ぼす影響を検討し、その物理モデルを定量的に確立してきた。本研究では、線形動物である線虫の卵割初期過程での形態変化をリン脂質ベシクルで培った力学モデルに収縮環による線張力の効果を加えて再現し、卵割過程においてどのように力学パラメーターを変化させて形状を制御させているのか、その力学モデルを確立する。

【結果と考察】

今回解析に用いた力学エネルギーモデルは、表面エネルギー・膜弾性エネルギー・接着エネルギーおよび収縮環による線エネルギーである。解析は1細胞から2細胞への過程と2細胞から3細胞への過程で行なった。線虫の卵割過程の観察結果を再現する解析で明らかになったことは、細胞が分裂するためには収縮環による線エネルギーだけではなく、膜弾性エネルギー特に収縮環によりくびれる領域での膜弾性率の連続的な変化と膜張力のバランスが重要であることがわかったことである。この結果は、木村らによって報告された解析結果[1]とも一致しており、卵割過程の形態形成における力学的な制御の理解につながると考えている。

【参考文献】

[1] Koyama H., Umeda T., Nakamura K, Higuchi T. and Kimura A. PLOS ONE 7, e31607 (2012).

酵母細胞における解糖系の振動と同期現象

(東北大 理) 永田昇・今井正幸
(海洋研) 車愈徹

【はじめに】

生体系には様々な振動現象が存在しているが、その中でもよく調べられているのが解糖系における振動現象である。解糖系は外部から取り込んだグルコースを分解して ATP および NADH を産生する反応過程であるが、その際に用いられるアロステリック酵素であるホスホフルクトキナーゼの非線形作用により生産物の濃度は周期的に変動する。近年、酵母細胞を対象に生産物 NADH の自家蛍光を顕微鏡で追跡し、解糖系の振動現象を可視化する研究が進み、細胞の密度によって振動の同期・非同期が現れるなど新しい現象が報告されている。ただし、解糖系の振動を顕微鏡下で観察する条件は非常に不安定であり、安定して振動を観察することは困難なことが多い。そこで本研究では酵母細胞を用いて様々な条件で振動現象を観察し、振動現象を最適に観察する条件を探索するとともに、その結果を解糖系の数理モデルによる計算結果と比較し振動現象を支配する要因を検討した。

【結果と考察】

今回解糖系の実験に用いた酵母細胞の株は ATCC9080 であり、この細胞を YPD 培地で前培養したのち、YNB 培地で本培養した。観察に用いる細胞は本培養の成長曲線から細胞の成長が静止期に入った直後のものをサンプリングし、グルコースを与えて解糖系を働かせた後、呼吸阻害剤として KCN を加え、呼吸器経路を遮断した。これにより観察時に解糖系のみを活性化させた。蛍光顕微鏡を用いて NADH の自家蛍光 (360 nm) 強度をモニターすると、約 40 秒の周期で蛍光強度が振動する現象が観察された。解糖系の材料であるグルコースの添加量を変化させると、振動の回数が変化した。これは先行研究の解糖系の振動現象の数理モデル (1) の結果と一致している。その他の観察条件についても検討を行っており、今回は観察結果と数理モデルとの対応の詳細について報告する。

【参考文献】

(1) J. Wolf, *et al.*, Biochem. J. 345, 321 (2000).

九大院理 ○福本昂平、杉野裕次郎、水野大介

【はじめに】

細胞や生体組織中では、モーター蛋白質や細胞自身の力生成により非熱的な揺らぎが生じ、非平衡状態が出現している。これらのシステムは、構成要素の組み合わせがレオロジー特性を決定する濃厚凝縮系でもあるために、非平衡揺らぎと系のレオロジー特性に強い相関が生じる。しかしながら、生体システムの構造や構成要素、内部の信号伝達過程は、あまりに複雑なため、組み合わせ非平衡系において力学特性が決定される物理的機構の解明には適さない。そこで本研究では、簡便なモデル系として遊走微生物(大腸菌)濃厚懸濁液を作製し、こうした組み合わせ非平衡系における揺らぎとレオロジーをマイクロレオロジー法により観測した。

【結果と考察】

物質交換の無い閉鎖 2 次元系で作製される従来の遊走微生物懸濁液中では、微生物は短時間(~10min)で遊走を停止するために、より長い計測時間を要するマイクロレオロジー計測が行えない。本研究では、半透膜を介してバルクの培養液と物質交換することで、3 次元領域中で半永久的に活発な遊走を維持する遊走微生物懸濁液を実現した (Fig.1, Fig.3)。

作製した懸濁液中に分散させたコロイド粒子の変位揺らぎと光補足力に対する応答を、レーザー干渉法を用いてマイクロレオロジー計測した結果を Fig.2 に示す。熱的な平衡状態で成立する揺動散逸定理(熱的な揺らぎと応答の関係)が、自己駆動する微生物が生み出す非熱的な揺らぎのために低周波数域で破れている (Fig.2)。さらに高濃度な条件下では、大腸菌の乱流的集団運動を確認しており (Fig.4)、こうした非熱的流動に伴う揺動散逸定理の破れと大腸菌懸濁液のレオロジー特性変化を系統的に調べるのが今後の課題である。

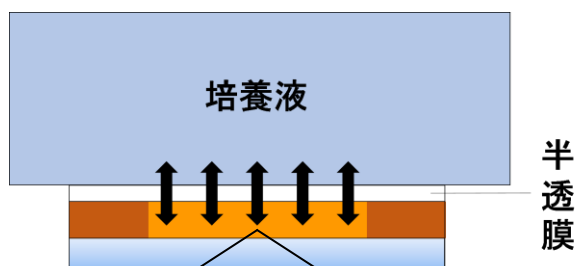


Fig.1: 培養液交換試料セルの模式図

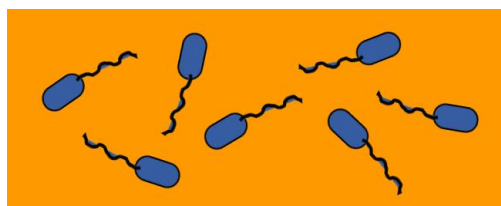


Fig.3: 試料内拡大模式図

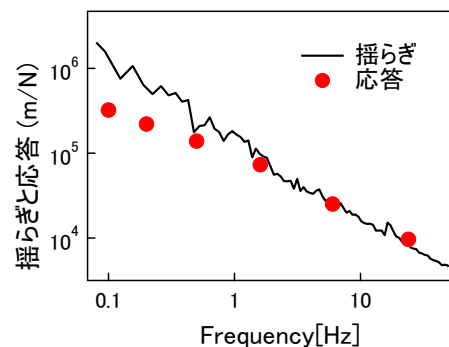


Fig.2: 低周波数域における揺動散逸定理の破れ。横軸は周波数、縦軸は周波数応答である。

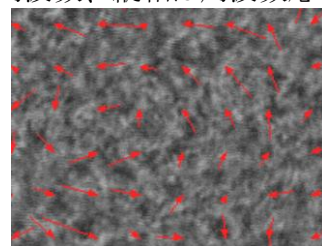


Fig.4: 大腸菌の乱流的集団運動の様子