

## A02, A04 生体高分子系における異常拡散現象

九州大学大学院理学研究院 坂上貴洋

九州大学大学院理学研究院 中西秀

東京大学地震研究所 齋藤拓也

広島大学大学院理学研究科 早瀬友美乃

一分子レベルの観測技術の発達に伴い、生体内をはじめとした複雑な階層構造を持った系では、平均二乗変位が時間に比例しない「異常な拡散現象」が数多く報告されてきている。このことは、そのような複雑系では通常の意味での中心極限定理は破綻しており、ミクロとマクロの間に位置する中間階層（メソスケール）において豊かな動的現象が潜んでいることを示唆している。本研究では、高分子を代表とする「多数の要素が連結した系」において一般的に重要となることが期待される「負の相関」の効果に注目し、それにより引き起こされる異常拡散をはじめとした動力学現象に着目した。熱平衡系での定式化と応用、さらに外的、もしくは内的に非平衡状態に駆動された粘弾性媒質中において発現する異常な動力学のメカニズム解明を目標として研究を行い、以下の成果を得た。

### 1) ラベルモノマーの異常拡散を記述する一般化ランジュバン方程式の導出[1]

高分子鎖上のラベルモノマーの運動は、遅い拡散 (sub-diffusion) が見られる典型例である。まずは今後の諸問題への適用を念頭に置き、厳密に解ける線形模型（ラウス模型）において、ミクロなモデルからラベルモノマーの遅い拡散を記述する一般化ランジュバン方程式を導出し、系に内在する多重の時間スケールの重ね合わせにより長時間に及ぶべき的な記憶効果が生じるメカニズムを明らかにした。一般化として、排除体積や流体力学的相互作用の効果を取り入れる近似的処方箋や、不規則分岐鎖上のラベルモノマーの運動を議論した。また、強い外力下での伸張過程について、張力伝播に伴う記憶効果という物理的描像を基にして非線形応答の特徴を解明した。生体高分子系への応用として、折り畳み転移における反応座標 (reaction coordinate) の異常拡散挙動[2]や、非熱的な能動ノイズに駆動される染色体上の遺伝子座のダイナミクスを議論した[3]。

### 2) 高分子膜のダイナミクス[4]

モノマーが二次元的に重合したシート状の巨大分子を高分子膜 (polymerized membrane) といい、しばしば、グラフェンシート、赤血球細胞などのモデルとして考えられる。排除体積を持つ高分子膜は、大きなスケールで平坦構造 (flat phase) をとることが知られているが、その動的性質については不明な点も多い。本研究では、高分子系での定式化を参考にすることにより、高分子膜上のラベルモノマーの異方的な遅い拡散を記述する一般化ランジュバン方程式を導出した。また、モンテカルロシミュレーションから得られた結果を動的スケール則の形に整理し、遅い拡散を特徴付ける指数と、高分子膜の構造を記述する臨界指数との間に成り立つスケール関係式を求め、理論計算とよく一致することを確認した (図1)。

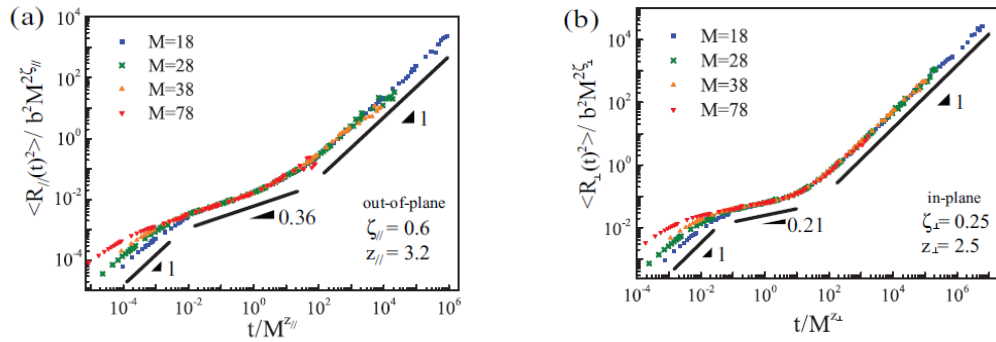


図1. モンテカルロシミュレーションにより計算した高分子膜上のラベルモノマーの平均二乗変位を動的スケーリング則の形に整理したプロット。左、右図はそれぞれ運動の面外、面内成分を表す。

### (3) ナノピストン系での DNA 分子圧縮ダイナミクス [5, 6]

長鎖 DNA 分子を直径がサブミクロン程度の筒状のチャネル (ナノチャネル) 中に閉じ込めると、DNA は筒の軸方向に沿って伸張する。この現象は、ゲノム科学での応用とも関連し、これまで、その平衡状態について多くの研究が為されてきた。本研究では、光トラップしたビーズを用いて、DNA を操作することにより、ナノチャネル中での DNA の動的性質について研究を行った (図2)。ビーズを一定の速さで動かし、DNA を一端から押す。この時の操作速度が十分ゆっくりであれば、DNA 分子は、単に並進移動をするのみである。しかし、操作速度がある臨界値を超えると、DNA 分子は特徴的な動的な応答を示し、一定時間の後に、空間的に不均一に軸方向に圧縮された定常状態へと至る。これらの過渡的過程、定常状態の両方について理論的解析を行い、実験との良い一致を得た。この圧縮過程は上記(1)で見た伸張過程の逆過程と見なせ、異常拡散と関連する平衡ダイナミクスの興味深い一例となっている。

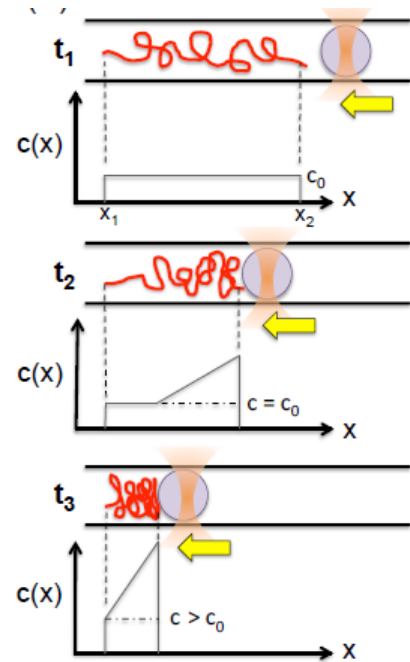


図2. ナノチャネル中の DNA 非が光トラップしたビーズにより圧縮される過程

### 参考文献：

- (1) T. Saito and T. Sakaue, *Phys. Rev. E* **92**, 012601 (2015).
- (2) T. Sakaue, J.-C. Walter, E. Carlon and C. Vanderzande, *Soft Matter* **13**, 3174 (2017).
- (3) T. Sakaue and T. Saito, *Soft Matter* **13**, 81 (2017).
- (4) K. Mizuochi, H. Nakanishi and T. Sakaue, *Europhys. Lett.* **107**, 38003 (2014).
- (5) A. Khorshid, P. Zimny, D. T.-La Roche, G. Massarelli, T. Sakaue, and W. Reisner, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 268104 (2014).
- (6) A. Khorshid, S. Amin, Z. Zhang, T. Sakaue, and W. Reisner, *Macromolecules* **49**, 1933 (2016).