

## 不安定系の周期的 evolution

九大・理 西 山 賢 一

分子結晶の研究会で話題を提供するのは、いくらか場違いかも知れぬが、われわれは生命現象に対して分子運動や相転移の視角から研究を進めようとしており、共通な場を期待してお話ししたい。

生命現象を非線型現象として扱えようとする試みは次第に広がっている（各種の threshold の存在が非線型性を物語る）。ここではもっと具体的な概念をつくり出していくことが課題となっている。今、feedback 機構がさらに加わると、非線型定常状態（cf. レーザー発振）や周期的変動といった状態がひきおこされる。

Prigogine たちは“dissipative structure”という概念を導入して、これらの状態を理論的に解明していこうとしている。<sup>1)</sup> エネルギーや物質の流れの中においてのみ成立する構造で、流入したエネルギーや物質の全てが巨視的な秩序に変わるのとは不可能である、といった意味で彼らはこのように命名している。われわれはこの構造の molecular dynamics と統計力学を築いてゆきたいわけであるが、まず歴史を見ておこう。

dissipative structure はこれまで化学反応系について主に調べられている。その研究の端緒は Turing によって開かれた。<sup>2)</sup> 彼は生物の形態形成に興味をもち、それを支配しているのはまず第一に化学反応系であろうとして、均一な化学物質の分布から不均一な分布にどのような条件下で移り得るかを詳しく調べた。この研究の結果から形態形成の奇想天外とも言えるモデルを提出するのであるが、その後分子遺伝学の発達により形態形成への答えは全く別の面から提出され出し、Turing のモデルはそのままの形では意味を失った。

Prigogine たちは Turing の研究から dissipative structure として大切な所を抽出し、さらに発達させようとしている（参考文献 1）およびそれに引用されている文献を参照されたい）。彼らの愛用する化学反応系は、





である。(3)の3重衝突の過程に positive feedback が含まれている。質量作用の法則を仮定すれば、

$$\partial X / \partial t = A + X^2 Y - BX - X + D_X \nabla^2 X, \quad (5)$$

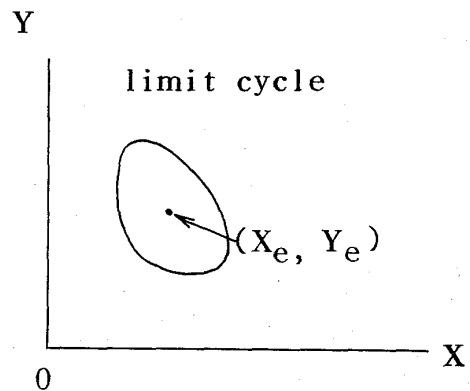
$$\partial Y / \partial t = BX - X^2 Y + D_Y \nabla^2 Y, \quad (6)$$

と表わされる。ここに、(1)~(4)の反応の速度定数は簡単のため全て1とした。また、 $D_X$ と $D_Y$ はそれぞれXとYの拡散係数である。今、A、B及びD、Eを一定にした上でX、Yの量の時間的変化を見ると、(A、B、 $D_X$ 、 $D_Y$ )の相互の大小関係によっていろんな場合が出現する。均一解は $X_e = A$ 、 $Y_e = B/A$ であり、(A、B、 $D_X$ 、 $D_Y$ )の限られた範囲でのみ dissipative structure が現われる(多くの範囲では、X、Yが発散してしまう)。又X、Yの拡散を無視すれば、(X、Y)平面に

において安定な limit cycle が現われ得る。

これは、生体反応でよく出会う周期的変動の現象を思いうかばせる。<sup>3)</sup>

Prigogine たちはさらに realistic なモデルをつくって研究を進めているらしい(J. Chem. Phys. などに近く発表される予定)。



ここでいくつかの新たな課題を考えてみよう。

- 1) 化学系のみならず力学系(相互作用力、粘性・弾性など)の効果をも取り入れること。これはすでに Turing が指摘した課題である。
- 2) 生産物、例えば(1)~(4)のD、Eなどが何か specific な器官をつくるといった過程を扱えぬか?
- 3) 系を特徴付ける物理量をさぐる。例えば、定常点近傍でのポテンシャル(E. E. P)<sup>1)</sup>、又非線型系のスペクトル分解、限られた系についての運動の恒量など。しかし、最も大切なものは未だ分っていないだろう。

次に、われわれの研究室で進められている、dissipative structure という

西山賢一

視点から生体運動系（主に筋収縮と原形質流動）を調べる研究を紹介する予定であったが、時間が大巾に超過したので、又の機会としてここで打切る。

#### 参 考 文 献

- 1) 最新の論文をあげておく。  
R. Lefever and G. Nicolis, J. theor. Biol. **30**, 267 (1971).
- 2) A. M. Turing, Phil. Trans. Roy. Soc. (London) B **237**, 37 (1952).
- 3) J. Higgins, Ind. Engng. Chem. ind. (int) Edn., **59**, 19 (1967).

この論文に、これまでの chemical oscillation の現象と理論的扱い（現象論的な）がまとめられている。

### External Vibration in Complex Crystals

神戸大・理 永井 旺二郎

複雑な分子結晶の問題は従来余り考えられていなかったが中性子線回折実験の技術の進歩及び大型電子計算機の開発に伴って特に諸外国で研究が行なわれるようになった。ここで今迄に行なわれているこの種類の研究を紹介し問題点を論じた

複雑な結晶の問題ではカップリングの強い幾つかの原子又はイオンの集まりを一つの大きな分子のように考えて（これを分子群 molecular group と呼ぶ）そして分子群の間の相互作用を考える。分子群としての振幅を外部振動（External vibration）分子群内の振動を内部振動（internal vibration）と言う。このような考え方が成立するのは、（1）結晶内にあるときと溶液内にあるときの分子群の内部振動数が非常に似ていることと、（2）内部振動数と外部振動数に大きな差があるときである。例として  $\text{NH}_4\text{Cl}$  内の  $\text{NH}_4^+$  -イオンについて内部振動を見よう。結晶内と溶液内とで  $\text{NH}_4^+$  -イオンの内部振動数の差は