

氏 名	はら だ たか ひろ 原 田 崇 広
学位(専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	理 博 第 2944 号
学位授与の日付	平 成 17 年 7 月 25 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	理 学 研 究 科 物 理 学 ・ 宇 宙 物 理 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	Energetics of Non-equilibrium Fluctuations (非平衡揺らぎのエネルギー論)

論文調査委員	(主 査) 教 授 吉 川 研 一	教 授 小 貫 明	教 授 太 田 隆 夫
--------	----------------------	-----------	-------------

論 文 内 容 の 要 旨

外界からのエネルギー入力を受けている系では、それを熱浴に散逸することによってエネルギー収支がバランスし、系が非平衡定常状態に維持される。このような非平衡系では、熱力学変数の揺らぎと応答の間に揺動散逸関係（熱浴の温度を比例係数として相関関数と応答関数が等しい）が成り立たないことが、非平衡統計力学の文脈において近年再認識され、その物理的意義が議論されている。

本論文では、生体内において等温環境下で化学的エネルギーを力学的エネルギーに変換している生体分子モーター系の系に注目し、その非平衡定常状態における揺動散逸関係の破れの物理的意義を調べた。その結果、分子モーターのモデルとして知られている Brownian ratchet model と呼ばれる Langevin 方程式系において、揺動散逸関係の破れの度合いが系のエネルギー散逸率に等しいことを示した。さらにこの結果は Brownian ratchet model に限らない、一般の非平衡 Langevin 系においても成立する事をいくつかの例を挙げて示した。

学位申請論文は、第一章 序言、第二章 非平衡系における揺動散逸関係の破れの測定実験、第三章 現象論的アプローチによる非平衡系のエネルギー論、第四章 非線形 Langevin 方程式からの揺らぐ応答方程式の導出、第五章 Brownian ratchet model における揺らぐ応答方程式の導出、第六章 揺らぐ応答方程式に基づいた Langevin 系のエネルギー論、第七章 結語および今後の展望、という構成になっている。以下に、申請論文の構成に沿って、その概要を述べる。

第一章では、生体内のモータータンパク質のような複雑な要素からなる系について、その振る舞いをモデル化する際の問題点を挙げ、実験的に測定可能な量による定量的に検証可能な理論を構築する必要性について指摘した。

次に第二章では、rocking ratchet と呼ばれる Langevin モデルに対応する実験系を構成し、その非平衡定常状態において、拡散係数と移動度との関係（Einstein の関係）を調べた。具体的には、光ピンセットシステムにおいて、焦点位置を高速で走査することで、水溶液中に擬一次的な周期ポテンシャル場を作り出し、そこに直径 100nm のポリスチレン粒子をトラップして、周期ポテンシャル上でのブラウン運動を計測する実験系を作った。この状況で周期ポテンシャルを時間周期的に揺ると、rocking ratchet というモデルに対応する状況が実現する。このような非平衡状態において粒子の実効的な拡散係数と外力に対する移動度とを独立に測定したところ、両者の間で Einstein 関係が破れていることが確認された。なお、Einstein の関係は Brown 粒子の速度に関する揺動散逸関係の特別な場合に対応する。実験条件に対応する Langevin 方程式を解析的および数値的に調べたところ、実験と対応する振る舞いを見いだすことができた。このような非平衡状態における揺動散逸関係の破れは、有効温度を導入することで解釈されることが多かったが、次章においてそのエネルギー論的な意義について考察する。

第三章においては、第二章で見られたような Brownian ratchet における揺動散逸関係の破れが、エネルギー論的にどのような意味を持っているかを考えるために、現象論的なエネルギー論の枠組みを構築した。それによると、系のエネルギー散逸率を揺動散逸関係の破れを用いて書き表せることが示唆された。この表式は実験的に測定可能な量だけで閉じているの

で、よく解析されている分子モーターの一種であるキネシンの実験結果を用いて評価してみたところ、キネシンのエネルギー効率に関する実験結果を定量的に説明することができた。しかし同じ表式を、Brownian ratchet モデルに対してより詳しく数値的に調べたところ、系の非線形性が大きくなってくると現象論的考察による結果は正確ではなくなることが分かった。

第四章では、第三章でうまくいかなかった原因を探るために、第三章での議論の出発点となっていた、現象論的な運動方程式（一般化 Langevin 方程式）の基礎付けを再考察した。その結果、モデル系を記述する非線形の Langevin 方程式を、揺らぎを含む見かけ上線形の応答方程式（揺らぐ応答方程式）へと恒等的に変形する方法を開発することができた。この形式にすると外部摂動に対する系の応答が明示的に現れるため、揺動散逸関係に関係する量を系統的に計算することが可能になる。この手法を用いて、簡単な駆動された Langevin 系の非平衡定常状態における速度相関や応答関数、またエネルギー散逸率などの表式を計算した。

第五章では、第四章で新しく開発した手法を用いて、いくつかの代表的な Brownian ratchet model を解析し、様々なタイプの Langevin 方程式系を、揺らぐ応答方程式の形に恒等的に変形できる事を示した。具体的には、flashing ratchet model というモデルに代表されるような、系に働く力が Markov 的に揺らぐモデル、系に時間周期的な外力がかけられているモデル、また、熱欲の温度分布が空間的に一様でない場合、などについて計算した。

第六章では、この手法を用いて、広いクラスの非平衡 Langevin 系のエネルギー論を再び考察した。その結果として、単位時間あたりのエネルギー散逸が、揺動散逸関係の破れの度合いを用いて表されることが明らかになった。この結果は、モデルの詳細によらず、Brownian ratchet 以外の非常に広いクラスの Langevin 系について成立する普遍的な関係式であることが分かった。また、実験的に測定可能な量で閉じた理論であるため、今後分子モーターなどの実験系で検証できるものと期待される。

第七章では、以上の研究を総括し、今後取り組むべき課題を述べた。

論文審査の結果の要旨

申請者の学位申請論文におけるこの仕事は、高い創造性を含んでおり、今後新しい研究分野を拓く可能性をもった学問的に意義のある仕事であると評価することができる。

まず、非平衡統計力学の歴史において長い間研究されてきた問題である、非平衡定常系のエネルギー散逸（エントロピー生成）の問題と、系に生起する揺らぎと外力に対する応答との関係（揺動散逸定理とその破れ）についての問題を統一的に扱う視座を提供した点である。これまでの非平衡統計力学においては、平衡に近い非平衡系（線形非平衡系）でのエントロピー生成率を、系の輸送係数および流れの大きさに結びつける議論は確立されていたが、平衡近傍のみを問題にしていたため、揺らぎと応答の関係は揺動散逸定理により規定されるとしてそれ以上追求されることはなかった。一方において近年、平衡から遠く離れた系のダイナミクスにおいて、揺らぎと応答の関係は、平衡近傍の揺動散逸関係とは大きく違うものになっていることが再認識され、揺動散逸関係の破れの物理的意義が議論されているものの、系のエントロピー生成率との同等性が明示的に議論されたことはなかった。

本学位申請論文における申請者の仕事は、「Langevin 方程式に従って時間発展する非平衡定常系においては、エントロピー生成率と揺動散逸関係の破れは、同じものの異なる側面をみているのである」ということを初めて明らかにしたという点で、非平衡統計力学の学問上意義深いものとなっている。申請者が得た結果は、特定のモデルに限定されることなく、これまでに研究されてきた様々なタイプの Langevin 系について、同様に成立するものであり、特に実際の実験の解析などに極めて有用であると期待される。この仕事のアイデアを発展させる事によって、これまで非平衡統計力学の異なる分野で独立に研究されてきた現象を統一的に理解するための下地を与えることになるであろう。Langevin モデルのような現象論的なモデルに立脚して議論が展開されている点や、そのような Langevin 系におけるエネルギーの定義などに議論の余地を残しているように思われるが、その点も含めて今後の研究の発展が期待される。

もう一つの特筆すべき点として、生体分子モーターのメカニズムの解明等といった、生物物理学的な問題に対して、これまでにない新しい研究の方法論を提案している点がある。

生体分子モーターのメカニズムとしてこれまでラチェットモデルのような現象論的モデルが多数提案されてきているが、それらの妥当性を実験的に検証することは困難であった。このような状況に対して申請者は、系の揺らぎや力学応答の計測などといった実験者が明示的に計測および制御する事が可能な情報を基本として、操作的に系を理解するべきである、という方法論を提案している。このような考えに基づいて、モデル系の実験的研究、それをベースにした現象論的考察に始まり、その概念を少しずつ精密化していくことによって、最終的に上述した際だった結果を得た。申請者が得た、非平衡の Langevin 系においてエネルギー散逸率と揺動散逸関係の破れの度合いとの間に成立する関係式は、不確実な仮定はほとんど不必要であり、広い枠組みの中で厳密に成立する。さらに実験的に測定可能な量で閉じた理論であるという点で今後の実験的研究などに大いに役立つ事が期待される。今の段階ではまだ得られる情報量は限られてはいるものの、従来からの現象論的モデルの解析によるアプローチや、実験と組み合わせて研究していくことによって、今後、生体分子機械のメカニズムの解明にブレイクスルーをもたらす可能性が高い。

以上に述べた点から総合的に判断し、本学位申請論文は格段に優れたものとなっており、博士課程三年未満での早期の学位取得に値するものであると言える。よって博士（理学）の学位論文として十分な学問的価値を有すると認め、合格とする。