

はじめに： 国際研究会「結び目とソフトマター物理」について

Introduction to the workshop: "Knots and soft-matter physics"

国際会議の規模：

研究会4日間全体で36件の講演発表があり、9件のポスター発表があった。外国人の招待講演者19名（米国9名、カナダ2名、英国3名、イタリア2名、スイス2名）、日本人招待講演者12名、日本人大学院生講演者5名、会議の参加者は約60名以上であった。

講演内容の解説：

結び目 (knots) とは、3次元空間中の閉曲線のトポロジーのことである。曲線を交差させることなく連続的に変形するとき、その曲線のトポロジーは一定であり、変化しない。2本以上の閉曲線全体のトポロジーを、絡み目 (links) とよぶ。例えば、輪ゴムと同じトポロジーの結び目を、自明な結び目とよぶ。

結び目の分類など、結び目理論はもともと数学の一分野である。しかし、高分子物理学や流体物理学など、結び目の知識の応用が重要となるような分野は数多く存在する。例えば高分子は長いひも状の形をしており、その絡み合いは高分子の物性において重要な役割を果たすと考えられる。例えば環状高分子や高分子ネットワークなどにおいて、トポロジーに関連して生じる広い意味での絡み合い効果を、トポロジー的絡み合い効果とよぶ。大腸菌のプラスミドのDNAなど、環状に閉じた高分子は天然に存在する。最近、分子量の大きな環状高分子が人工的に合成できるようになった。この結果、トポロジー的絡み合い効果を組織的に研究し、その成果が実験で検証される可能性が十分に現実的となった。本研究会の目的は、トポロジー的絡み合い効果の理論と実験の報告である。理論は数学、統計物理、生物物理、流体物理などの分野、そして実験はDNA、タンパク質、合成高分子などが主な対象である。

この研究会の中心的テーマは、結び目のソフトマター物理学への応用である。しかし、関連する分野は数学、物理学、生物学、生化学など多分野にわたる。さらに非常に幅広い話題が講演され、その全てを解説することは不可能である。そこで、代表的な話題をいくつか選んで、できる限り分かりやすい説明を試みる。

(1) 第一日目の講演 (Aug. 26)：

初日は結び目や絡み目およびランダムウォークに関する数学や統計物理の理論研究に関する講演が中心であった。最初の講演は、格子上の自己排除的ポリゴン (Self-Avoiding Polygons, 以下SAPと略記) の結び目や絡み目に関する数学的研究の報告である。講演者のS.G. Whittingtonはフロリダ州立大学のD.W. Sumnersと共同で、格子上の自己排除体積鎖 (Self-Avoiding Walks, SAW) が必ず結び目を生じることを数学的に厳密に証明した業績で有名である。結び目の統計物理学に関して国際的な第一人者の一人である。現在、J. Phys. A: Theor. Gen. の編集者でもある。講演では、結び目の出現確率に関する理論を自己排除体積鎖でつくられる空間グラフに対する拡張について報告した。

高分子が非常に長いとき、高分子は高い確率で結び目をつくるのではないか、という予想が、1960年代に Frisch と Wasserman、そして Delbrück によって独立に提出された。格子上の長さ n の可能な SAP の数 p_n は n に関して指数関数的に増加することが知られている。すなわち

$$\frac{1}{n} \lim_{n \rightarrow \infty} p_n = \kappa$$

となる正数 κ が存在することが証明されている。そして、自明な結び目のトポロジーをもつ SAP の数を p_n^0 とあらわすと、Sumners と Whittington 達は、次のような正数 κ_0 の存在を証明した。

$$\frac{1}{n} \lim_{n \rightarrow \infty} p_n^0 = \kappa_0$$

さらに κ_0 は κ より小さいことも証明されている。

$$\kappa_0 < \kappa$$

この結果、格子上の SAP では、結び目が自明である確率 p_n^0/p_n はその長さ n に関して指数関数的に小さくなることが分かった。すなわち、Frisch-Wasserman-Delbrück による予想が証明されたのである。Whittington の講演は、この結果を空間グラフ、特に θ グラフに拡張する。 θ グラフとは、文字 θ と同じ形状のグラフのことで、環状ループの中に一本橋が架けられたものである。そして、十分に長い θ 型の格子上のランダムなグラフを考えると、それが結び目を生じていない確率は指数関数的に小さくなることを、数学的に厳密な方法により証明した。

続く河内の講演では、グラフの結び目における結び目解消数の拡張の定義を導入した。また、グラフの結び目の複雑さを表すある指数が新たに導入された。これらの新しい数学的理論は Whittington の講演内容と密接に関連し、近い将来に統計物理学に応用される可能性が高い。その次の Diao と Ernst の論文は数学的研究結果の報告である。一つ目の論文では、代表的な結び目不変量であるジョーンズ多項式を、「代数的な結び目」という結び目の種類に対して多項式時間で計算する新しいアルゴリズムが報告された。代数的結び目とは、タングルという図形を組み合わせで導かれる結び目の種類のことである。そして、二番目の論文では、太さをもつ紐でつくられた結び目の結び目長に関する数学研究が報告された。そもそも結び目理論における「ひも」には太さが存在しない。しかし最近、太さをもつひもで作られた結び目の幾何学的性質が研究され、数学的理論が展開されている。結び目長とは、太さ 1 インチのロープを使って、与えられた結び目を結ぶのに必要な最小の長さのことである。Soteros は立方格子上の二つの SAP でつくられる絡み目に関する数学的理論を報告した。Rawdon は自明でない結び目をもつ環状高分子の形状に関する数値シミュレーションによる統計的な研究を報告した。ランダムウォークの瞬間的な形は非常に細長いことが知られている。排除体積をもたない環状高分子（ランダムポリゴン）にトポロジーを制限した場合にも、同様に細長くなるであろうか、という疑問を追求した。この問題は自明ではない。実際、des Cloizeaux (1981) によって最初に指摘されたように、ランダムポリゴンのトポロジーを一定とする制限を課した場合、ランダムポリゴンのセグメント間に実効的な反発力が作用すると解釈できるからである。最後に Micheletti によって、閉じた空間領域内に存在する SAP に出現

する結び目に関する統計力学的研究が報告された。これはP4バクテリオファージのDNAが小さな領域 (capsid) 内に存在し、実験でその中に見出される結び目の分率を説明することが研究の動機である。

(2) 第2日目の講演 (Aug. 27) :

2日目には、物理学 (太陽のフレア)、工学 (高分子結晶、合成環状高分子)、さらには生化学 (タンパク質の結び目) における結び目理論の応用研究が報告された。

Berger の報告によれば、太陽フレアには磁力線の束が対応し、これは電磁流体物理学を用いて記述される。ヘリシティ不変量を定義してその応用が議論された。

次に、高分子結晶化に関する講演が2件続いた。高分子結晶化の最初の過程において、高分子結晶の微視的な核が形成される。その際に絡み合いが重要な役割を果たすことが、実験的研究によって明らかにされた (山崎)。ポリエチレンの線形鎖と環状鎖の結晶化における核形成率 I の測定結果が過冷却温度 ΔT の関数として示されている。次に奥居によって、これら高分子結晶の微視的な核が集合して成長する過程における絡み合い効果の研究が報告された。高分子鎖の折れ畳みの過程では重合度によって差が生じ、高分子のトポロジーが重要である。一方、レプテーションを通じて絡み合いが解消されるため、結晶成長における鎖の折れ畳み過程では絡み合いの効果は見られないとのことである。二日目の午前の最後に、非常に純度の高い環状高分子の合成する方法が最近確立されたことが、高野敦志 (名大) によって報告された。(講演題目: Chain dimension of ring polystyrenes in solution, ただし研究会報告は未提出。) 従来、環状高分子の合成は非常に困難であり、合成環状高分子の純度は大体80パーセント程度のサンプルしか存在しなかった。ところが最近、分子量が大きくかつ非常に高い純度、99.6パーセントのサンプルが合成された。この手法により、環状高分子の統計物理学は実験的に検証される道が拓かれたことの意義は大きい。

二日目の午後はタンパク質における結び目の研究である。まず最初に猪飼によって、原子間力顕微鏡 (AFM) を用いてタンパク質を引っ張ってだんだんとほぐしていくという一分子レベルの実験 (延伸実験) が最近可能になったことが報告された。炭酸デヒドラーゼのふたつの末端を反対方向に引っ張ると、伸長後に三葉結び目が形成される。他の多くのタンパク質では両端を引っ張ると分子構造が緩められるが、結び目が存在する場合には逆に分子構造が硬くなる。その伸長と応力のグラフ曲線には、タンパク質の中の様々な構造が反映されていると考えられる。ちなみに、タンパク質の延伸実験は、猪飼の研究グループが最初と思われる。Virnau はタンパク質の結び目に関するシミュレーション研究を報告した。Sulkowska はタンパク質の結び目に対する延伸実験の結果を説明する理論的研究に関して、現在の状況を概説した。延伸実験の伸長と応力の関係を、タンパク質の微視的なモデルを解析して理解しようと試みる研究の総合報告である。

二日目の午後の最後に、ポスターセッションが行われ、活発な質疑応答が行われた。

(3) 第3日目の講演 (Aug. 28) :

3日目の前半はDNAと結び目に関する実験的研究と理論的研究、後半は分子動力学などの数値シミュレーションによる研究結果が報告された。

吉川によって、DNAの示すコイル・グロビュール転移について最近の研究結果が報告された。DNAはウオームライク鎖模型という弾性をもったひも、*semi-flexible polymer* であり、例えばコイル・グロビュール転移などにおいても *flexible polymer* とは異なった振る舞いが見られる。次に Dietler によって、表面に吸着したDNAをAFMで観察及び計測することにより、分布関数などに見られる高分子のスケーリング則が直接実験で確認されることが報告された。Zechiedrich によって、DNAとタンパク質の関係について興味深い見解が提案された。DNAとタンパク質が相互作用するとき、従来は、巨大なタンパク質の質量の方がDNAよりもはるかに大きく力学的に安定であるため、タンパク質の構造などに中心的な重要性があると仮定されてきた。しかし、DNA二重らせんの *all-atom* シミュレーションの結果、むしろDNAの動的な振る舞いが重要である、という新しい見方が提案された。Stasiak によれば、生体中において環状DNAが複製される際に途中で結び目が生じていることが実験で明らかにされている。しかし、DNAがスーパーコイルの形状をとった場合には結び目が生じにくいことが実験的に知られている。そして今回はこの実験事実を理論的な解析から議論した。下川によって、トポイソメラーゼがDNAに行う作用を解析する数学的理論が報告された。この理論は、3次元多様体を分類するのに用いられた結び目理論を応用して構築されたものである。

午後の後半からは主として高分子ダイナミクスのシミュレーション研究が報告された。Yeomans によって、閉じた空間内に存在する高分子のシミュレーションが報告された。研究会報告では、高分子液滴の粘性、特にシアに対する応答の動的振る舞いに関するシミュレーション結果が示されている。荒木によって、液晶における欠陥のトポロジーを数値シミュレーションによって解析した研究結果が報告された。最後に大学院生による短い講演が3件行われた。坂は、溶液中の結び目高分子の平均構造について報告した。ブラウン動力学を用いて結び目高分子のランダムな配置を生成し、平均構造を求めた。金枝は、結び目高分子の溶液が示すであろう固有粘度を、流体力学的相互作用を取り入れたブラウン動力学によるシミュレーションで求めた。平山は、二つのSAPを重心間距離を一定にして生成したとき、絡み目が生じる確率を数値的に求め、重心間距離依存性を表す近似関数を導いた。この近似関数はカイ自乗値も良い値を与える。

(4) 第4日目の講演 (Aug. 29) :

4日目は再び物理における結び目（素粒子論、ピアノ線の結び目）から始まり、環状高分子鎖の統計物理学の報告が2件あり、午後は結び目に関連する数学の報告が2件あり、大学院生による短い講演2件の後、最後に、環状高分子鎖の統計物理学の報告が1件行われた。

最初に Kephart により、絡み合い数を用いてAB効果を一般化が議論された。さらに、量子色力学で記述されるグルーオンの励起状態の質量分布が、色力線で作られた理想結び目の長さの分布と非常によく対応することが報告された。これは電磁流体力学における磁力線の結び目と

同様な見方であるが、素粒子の実験データと良く適合している。現象論的に有効な見方になる可能性もあり、興味深い。次に Pierre-Louis によって、ピアノ線で作られた結び目が議論された。エントロピーが重要な高分子とは対極的に、ピアノ線の弾性エネルギーのみが問題となる。ピアノ線の結び目のブリッジ数 (bridge number) が最低エネルギー状態を特徴づける際に重要なことが示された。津留崎は、二つの環状ランダム鎖が絡み目を生成する確率を用いて、ゴム弾性の非線形性を説明する理論的研究を報告した。

午後は、今井によって、結び目を近似する多角形の数学的理論、そして谷山によって、結び目を解消するトンネル数に関する数学的理論が報告された。石原（数学科大学院生）により、格子上の自己排除体積をもつ環状鎖で5交点の結び目を作るのに必要かつ十分な最小ステップ数に関する数学的結果が報告された。DNAを実験的に研究した荒木（大学院生）により、クロマチンの構造に関する報告が行われた。そして、本国際会議の最後に出口により、シータ温度の環状高分子溶液に見られる新奇なスケーリング的振る舞いが報告され、今後解決すべき、興味深い問題であることが指摘された。

以上のように、講演発表の内容は数学、物理学、生物学、生化学など多分野にわたり、異分野間の研究交流が活発に行われた。例えば、高分子はソフトマター物理学において重要な研究領域であり、高分子結晶成長の制御は工学上も非常に重要な課題である。最近、高分子の結晶成長過程にトポロジーの概念にもとづく絡み合いの記述が用いられ始めている。そして本研究会に参加した結晶成長の専門家にとって、本格的な数学の結び目の理論やその応用に関する講演は非常に刺激的であったとの感想を聞くことができた。実際、タングルなど、結び目理論の中に登場する考え方が高分子結晶成長でも現われている。一方、数学の結び目理論の研究者にとっては、結び目理論の中にいるだけでは知りえない、非常に幅広い応用研究に接することにより、数学理論の自然科学や工学における重要性を確認し、今後の発展の可能性を確認することができたことであらう。