

情報を自由エネルギーに変換する

中央大学 理工学部 鳥谷部 祥一¹

Maxwell の悪魔は、熱力学法則の根幹に関わる疑問を投げかけ、熱力学第二法則の意味するところを再び考え直し、観測や情報が熱力学において果たす役割を理解する契機となった。特に、1929 年に考案された Szilard エンジンは、情報量と熱力学量を操作的に結び付けて定量的な評価を可能にした。しかし、情報を自由エネルギーに変換する情報熱機関は未だに実験で実現できていない。我々は、新規の実験系を開発し、この情報エネルギー変換を実現した。さらに、情報熱機関の動作を規定する基本原理と考えられる、フィードバック系に拡張された一般化 Jarzynski 等式 [Sagawa and Ueda, *PRL*(2010)] を検証した。また、関連する話題として、分子モーターに関する最近の実験についても触れたい。

1 情報熱機関の実現

2 個連なった直径 300 nm 程度のコロイド粒子をガラス上の 1 点にピン止めすると (図 1a), 粒子はこの点の周りで自由に回転でき、回転ブラウン運動を示す。床のガラス面には 4 つの電極が蒸着してあり、これらの電極に 1 MHz の高周波交流電圧をかける。電極ごとに位相を適当に変えると、1 MHz で楕円状に回転する電場が生じ、粒子は勾配のある $\sin$ 状ポテンシャルを感じる (図 1b)。この楕円状回転電場の軸の方向を切り替えることで、ポテンシャルの山と谷を瞬時に反転させることができる。この新しい実験系を用い、次のようなフィードバック操作を行った (図 1c)。粒子の定期的に観測してその角度をリアルタイムで解析する。粒子が谷から少し登った S という領域にいた場合、 ε の時間遅れの後でポテンシャルを切り替える。一方、S にいなかった場合は、何もしない。このようなフィードバックサイクルを繰り返すと、粒子が勾配に逆らって回転する、つまり、粒子が勾配を登ることが観察された (図 2a)。

ポテンシャルをスイッチする時に、粒子の位置によって、粒子は電場から仕事をされたり、もしくは、粒子が電場に仕事をしたりする。粒子が勾配を登って得た自由エネルギー (ΔF) とスイッチングによる仕事 (W) の差の 1 サイクルあたりの平均をプロットしたのが図 2b である。測定してからポテンシャルを切り替えるまでの時間 ε が短い時は、 $\langle \Delta F - W \rangle > 0$ となり、外からした仕事以上の自由エネルギーを粒子が獲得していることが分かった。この結果は、熱力学第二法則に反しているように見える。これが実現できたのは、粒子の熱揺らぎを測定し、その揺らぎ方に応じてポテンシャルを制御したためであり、粒子の角度に関する情報を自由エネルギーに変換できたと言える。ただし、マクロな悪魔 (コンピュータやカメラ) では、ミクロな系で取り出せた自由

¹E-mail: toyabe@phys.chuo-u.ac.jp

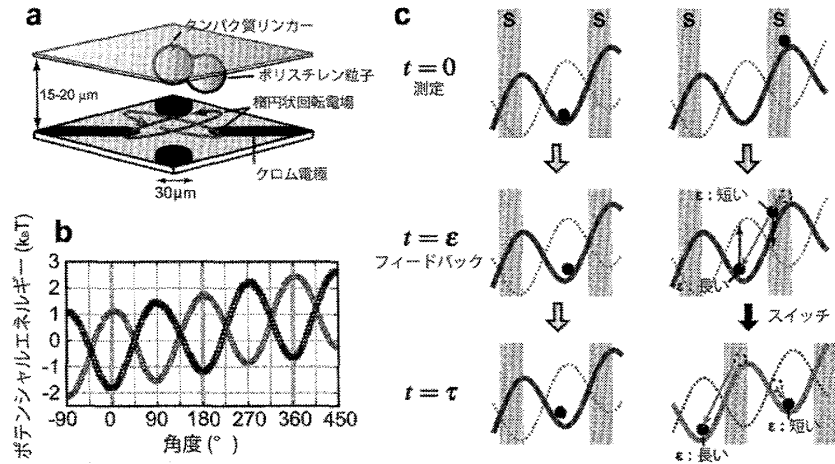


図 1: a, 実験系. 直径 300 nm のポリスチレン 2 個粒子が 1 点でガラス上に固定. b, 粒子の感じるポテンシャル. 楕円状回転電場の方向を変えることで, ポテンシャルの山と谷を反転させることができる. c, フィードバック操作. 領域 S に観測された場合, $t = \varepsilon$ でポテンシャルを切り替える. ε がフィードバックの効率を決める. $\tau = 44$ ms.

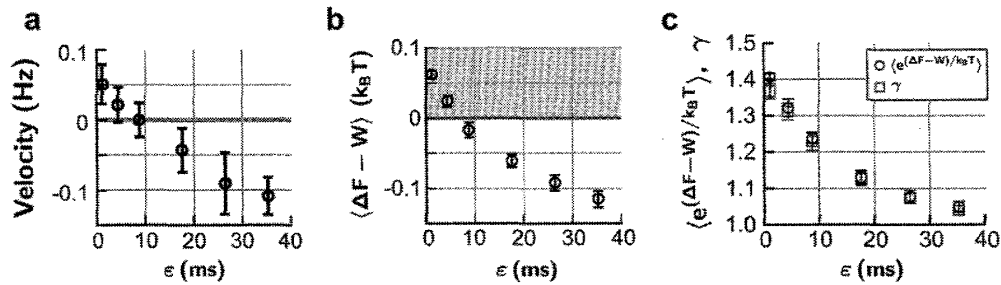


図 2: a, 平均回転速度. ε は測定してからスイッチするまでの時間遅れ. b, $\Delta F - W$ のサイクル平均. c, 一般化 Jarzynski 等式の検証. γ はフィードバック能率と呼ばれ, 操作の可逆性の程度を表す.

エネルギー差に比べて莫大なエネルギーを消費しており, したがって, これらを合わせた系全体では, 熱力学第二法則は破れていない. しかし, ミクロな系だけに着目すると, 情報から自由エネルギーに変換されたと解釈できる. 観測で得られた相互情報量を I とすると, $k_B T I$ の自由エネルギーがフィードバックによって取り出せることが知られている [1]. $\langle \Delta F - W \rangle / k_B T I$ を情報エネルギー変換効率と定義すると, 今回の実験では, 最大で約 30% の効率であった ($\varepsilon = 1.1$ ms).

また, 最近, フィードバック系に拡張された一般化 Jarzynski 等式が導かれた [2]:

$$\langle e^{\beta(\Delta F - W)} \rangle = \gamma. \quad (1)$$

γ は観測で得た情報量をどの程度効率的に利用できたかを定量化した量であり, フィードバック能率と呼んでいる. フィードバック実験とは独立に γ を測定し, 一般化 Jarzynski 等式 (1) が成り立つことを高い精度で示した (図 2c). (1) は情報熱機関の動作を規定する基本原理であると期待でき, これを初めて実験で検証することができた.

2 分子モーターの状態ごとの力学ポテンシャルを推定する

F_1 -ATPase (以下, F_1 モーター, 図3) は回転分子モーターであり, ATP を加水分解しながら, 中心の γ シャフトが一方方向に回転する [4]. F_1 モーターをガラスに固定し, γ シャフトに大きなプローブをつけることで, その回転を顕微鏡下で可視化することが可能である. 分子モーターはナノメートルサイズの化学エンジンであり, 化学ポテンシャルから力学的なポテンシャルを作り出し, 力学的な運動を引き起こす. したがって, 反応スキームだけでなく, エナジेटイクスを議論することがその動作原理を理解する上で重要である. これまで, F_1 モーターが回転を通じて散逸する熱や, ATP 加水分解から実際に取り出せる最大仕事を測定することに成功している [5]. しかし, 力学的な運動を引き起こす力学ポテンシャルそのものの形を知ることができれば, エナジेटイクスに関する理解が急速に深まると期待できる. 我々は, F_1 モーターの1分子トラジェクトリのみから, γ シャフトが感じる化学状態ごとのポテンシャルを見積もることを試みた (図3).

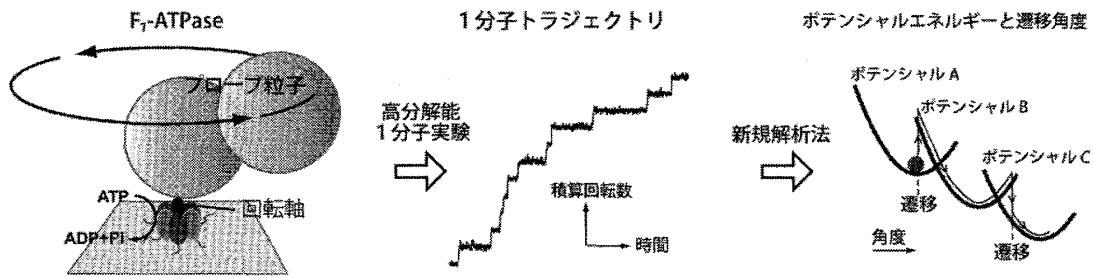


図3: 1分子実験で得られたトラジェクトリから, 化学状態ごとのポテンシャルを描くことを目指す. 分子モーターの動きを, 離散的な状態間の遷移としてモデル化. 各ポテンシャルは異なる化学状態に対応する.

まず, 実験で得られた回転トラジェクトリ $\{x_k\}$ に対し, 各フレーム k がどの化学状態にいるかという状態列 $\{s_k\}$ を推定する. これは, 与えられた $\{x_k\}$ の経路確率を最大化する状態列 $\{s_k^*\}$ を求めれば良い. 状態数を N としてトラジェクトリの長さを L とすると, 可能な状態列は N^L 通りある. F_1 モーターは, 1つの ATP 加水分解により 120° 回転するので, $N = 3$ である. 一方, $L \sim 1,000,000$ であり, 可能な状態列の数は莫大である. しかし, 隠れマルコフモデルで系をモデル化し, Viterbi アルゴリズムを用いると, N^L 通りの状態列の中から $\{s_k^*\}$ を N^2L の計算コストで求めることができる. ひとたび $\{s_k^*\}$ が決まれば, 詳細つり合い関係を用いて, 各状態におけるポテンシャルエネルギーは, 容易に得ることができる.

実際に, F_1 モーターの1分子トラジェクトリを上記の方法で解析し, ポテンシャルを見積もったのが図4bである. この方法を用いると, さらに, 状態間遷移がどの角度で生じているかをも見積もることができる. 興味深いのは, 状態間遷移は, ランダムに生じているのではなく, ポテンシャルの底から少し先に進んだ非常に狭い範囲で生じており, しかも, ポテンシャルの交点付近であることである. 遷移角度の分布は, 各状態でのポテンシャルに対応する平衡分布とは明らかに異なる. これは, F_1 モーターが γ シャフトの角度を観測し, その角度に応じて状態を切り替えていると解釈できる.

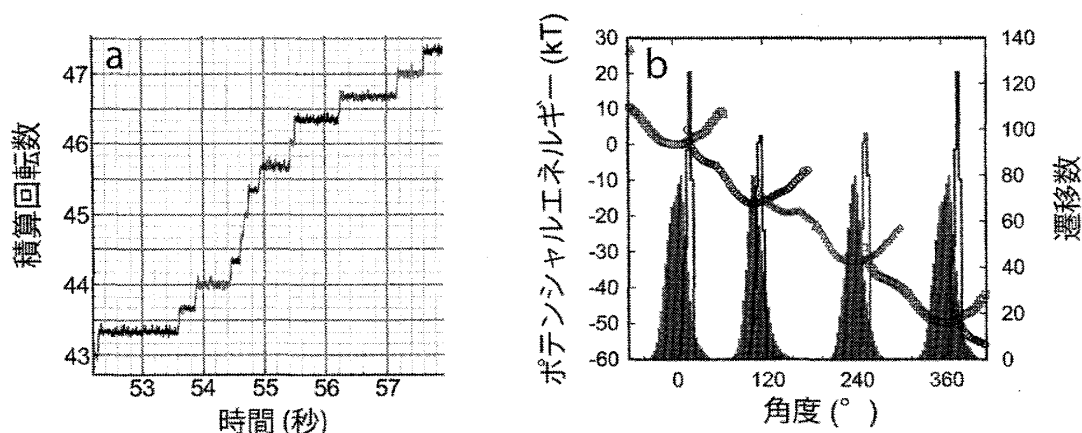


図 4: **a**, トラジェクトリを化学状態ごとに区切る. $0.4 \mu\text{M}$ ATP, $4 \mu\text{M}$ ADP, 1 mM P_i . **b**, ポテンシャルプロファイル. 溶液条件から計算した ATP 加水分解の自由エネルギー変化 $16.6 \text{ k}_\text{B}T$ ずつずらしてプロットした. 実線のヒストグラムは, 状態間遷移の生じた角度のヒストグラム. 塗りつぶしたヒストグラムは, 各状態でのポテンシャルに対応する平衡分布.

3 まとめ

個々の熱揺らぎを観測し, その情報に基づいて制御すれば, 熱揺らぎからエネルギーを汲み出せることを示した. そして, F_1 モーターも, そのような機構で動いている情報熱機関かもしれないことが示唆された. しかし, 本稿の前半の実験系とは異なり, F_1 モーターの場合, 何が悪魔で何が被測定系かは現時点では分からない. そもそも, これらを完全に分離できないように思える. 測定系と被測定系が絡み合った系を理解する方法論の開発は, 今後の課題である.

情報熱機関に関する研究は, 沙川貴大氏, 上田正仁氏, 宗行英朗氏, 佐野雅己氏との共同研究である. 分子モーターのポテンシャル推定に関する研究は, 上野博史氏, 宗行英朗氏との共同研究である.

- [1] L. Szilard, *Z. Phys.* **53**, 840 (1929), T. Sagawa and M. Ueda, *PRL* **100**, 080403 (2008).
- [2] T. Sagawa and M. Ueda, *PRL* **104**, 090602 (2010).
- [3] S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki, and M. Sano, *Nature Phys.* **6**, 988(2010).
- [4] J. P. Abrahams *et al.*, *Nature* **370**, 621 (1994), H. Noji, R. Yasuda, *et. al.*, *Nature* **386**, 299 (1997).
- [5] S. Toyabe, T. Okamoto, T. Watanabe-Nakayama, H. Taketani, S. Kudo, and E. Muneyuki *et al.*, *PRL* **104**, 198103 (2010), S. Toyabe *et al.*, *submitted* (2010).