

自己紹介

名前: 吉森 明 (よしもり あきら)

プロフィール: 1963年 名古屋生まれ
1982年 大阪府立豊中高校
1982年 名古屋大学理学部入学
1991年 名古屋大学大学院修了理学博士
1991年 農林水産省入省(釧路)
1993年 名古屋大学物理学科助手
1996年-97年 カナダ、British Columbia大学(バンクーバー)
文部省在外研究員
1997年 九州大学物理学科助教授

所属: 九州大学大学院理学研究科物理部門
物性理論研究室
研究: 化学物理(理論)

趣味: 合唱、小説、漫画、フィギュアスケートを見ること

電子メール: a.yoshimori@cmt.phys.kyushu-u.ac.jp

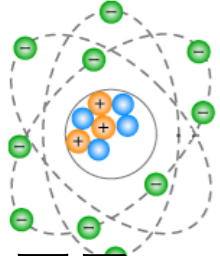
<http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/>

物性理論グループの研究



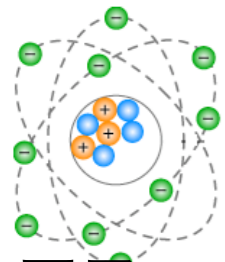
物理学は何を対象とする

物理学は何を対象とする

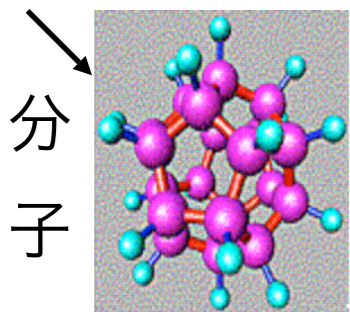


原子

物理学は何を対象とする

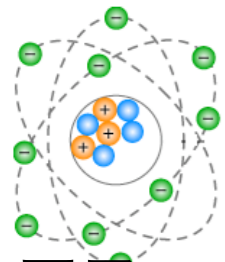


原子

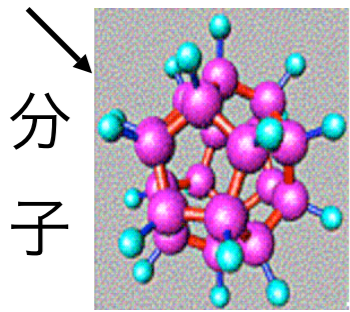


分子

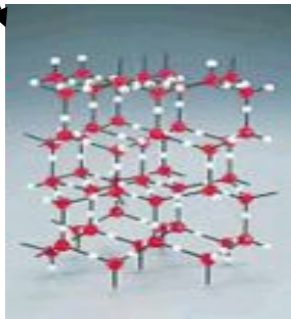
物理学は何を対象とする



原子

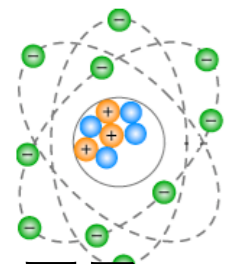


分子



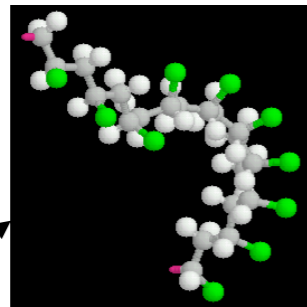
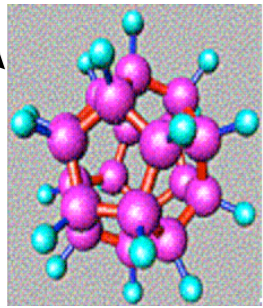
結晶

物理学は何を対象とする

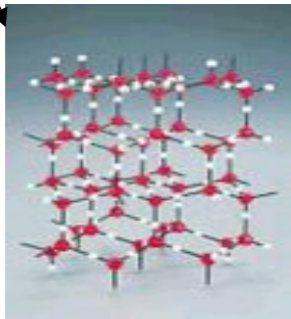


原子

分子

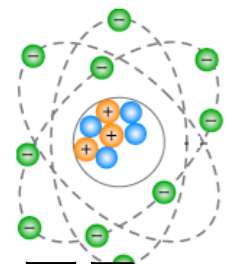


高分子



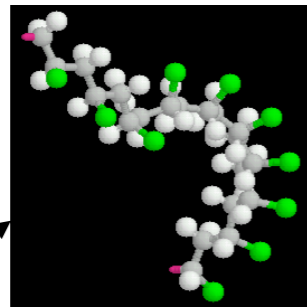
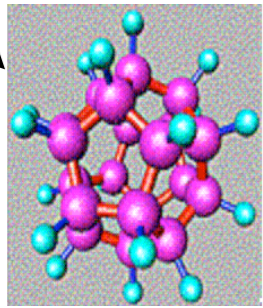
結晶

物理学は何を対象とする

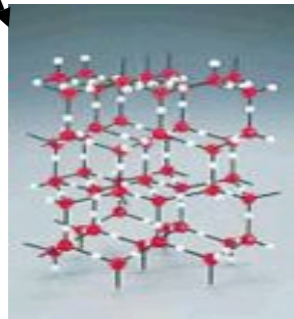


原子

分子



高分子

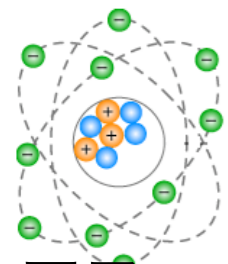


結晶



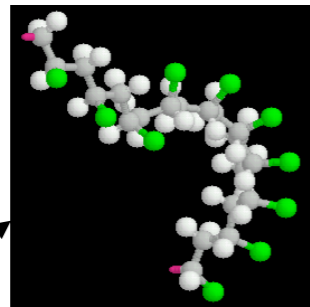
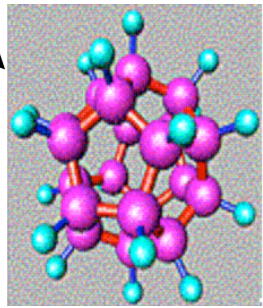
ガラス

物理学は何を対象とする

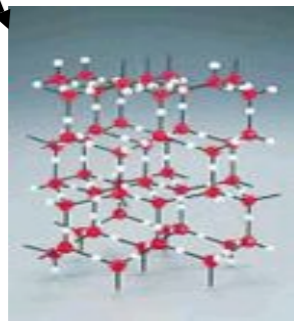


原子

分子



高分子



結晶

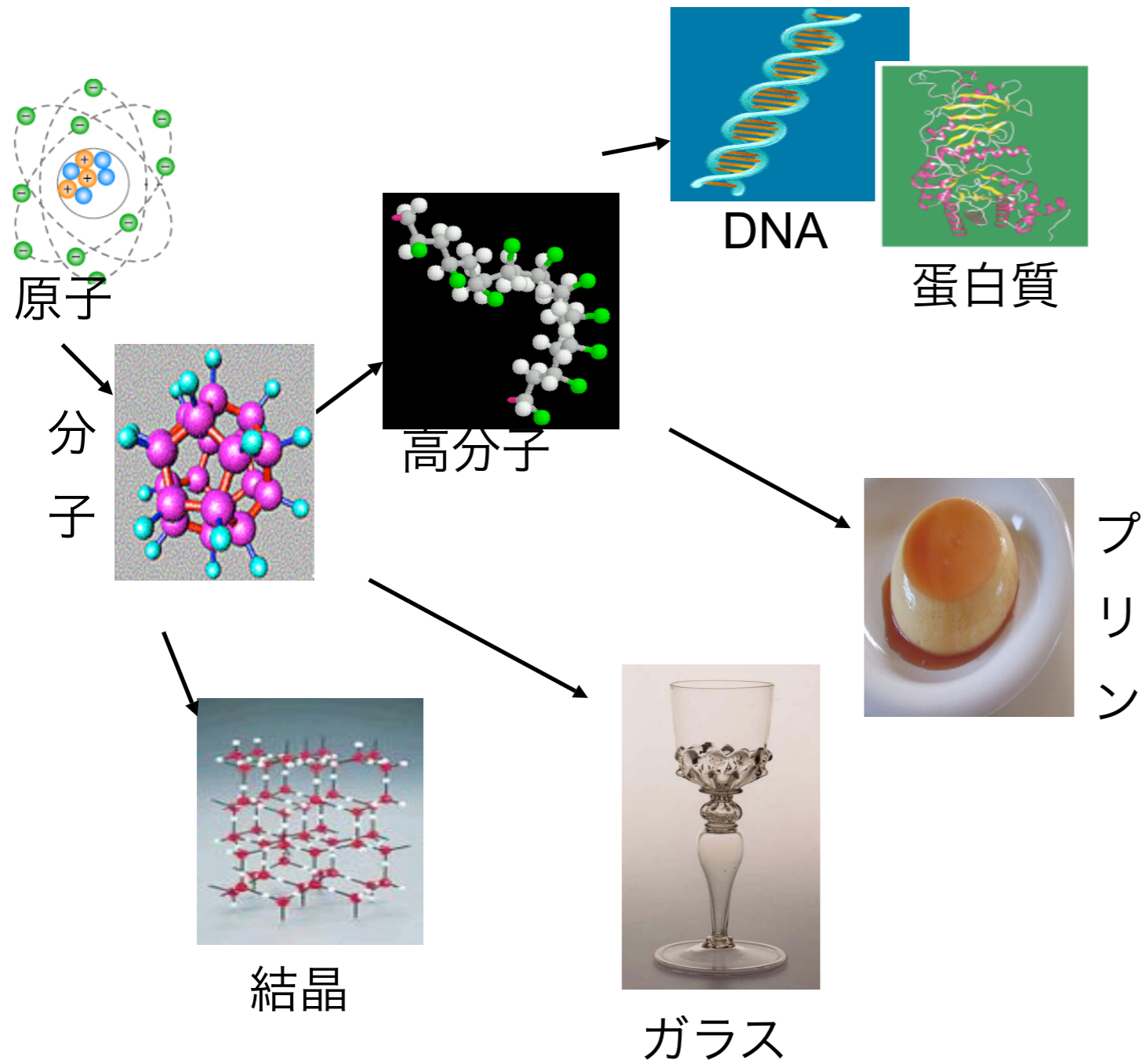


ガラス

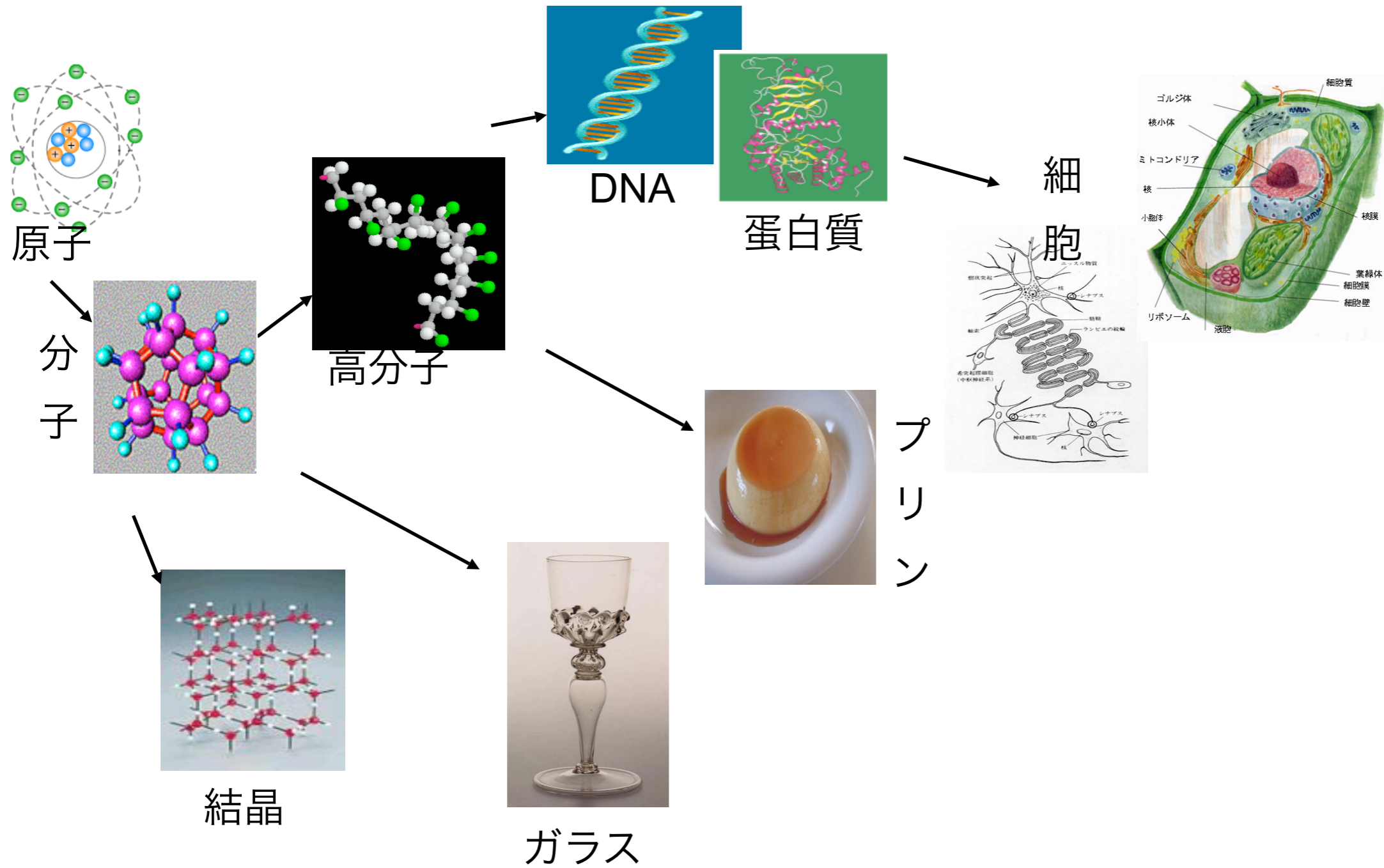


プリン

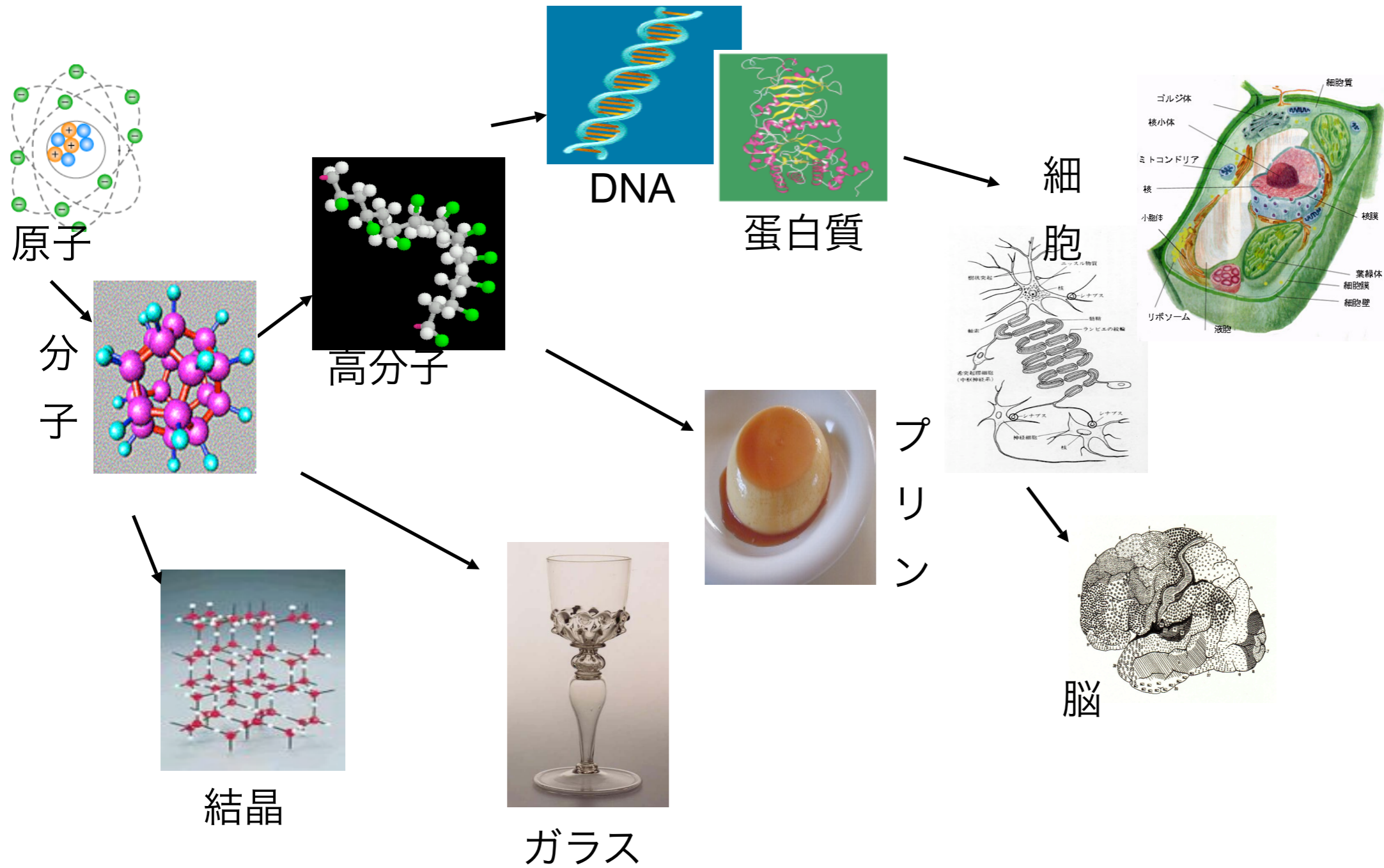
物理学は何を対象とする



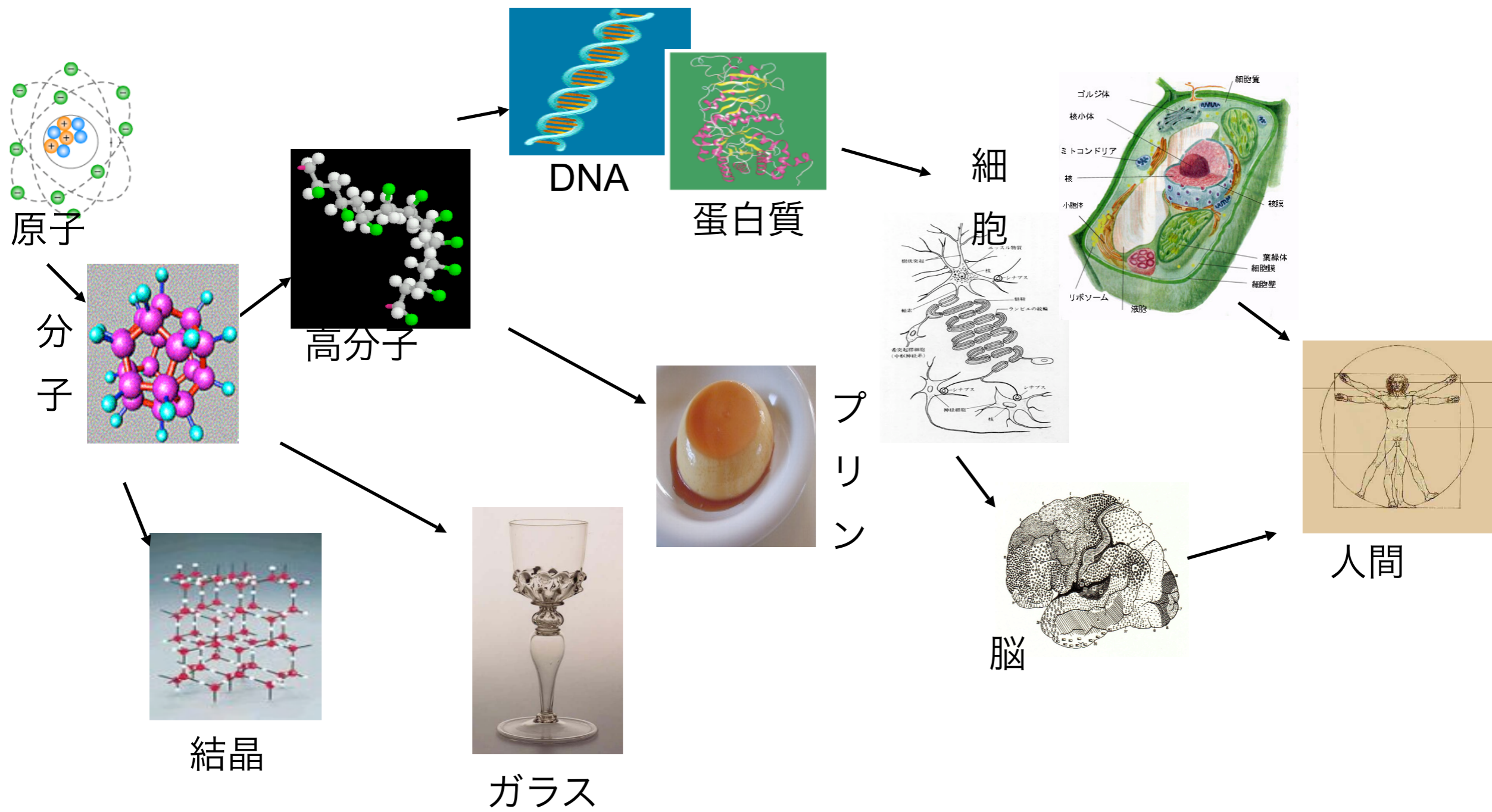
物理学は何を対象とする



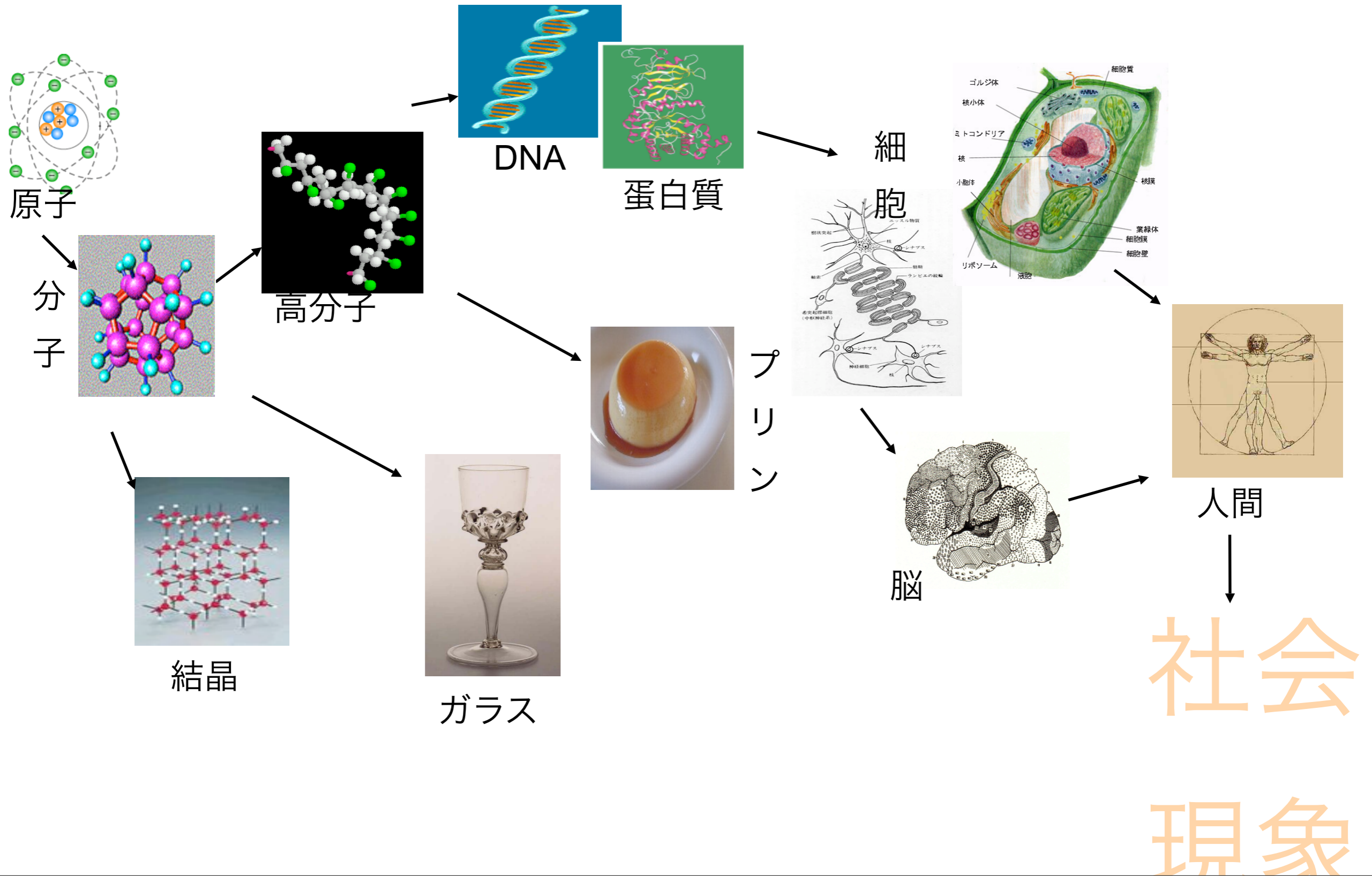
物理学は何を対象とする



物理学は何を対象とする



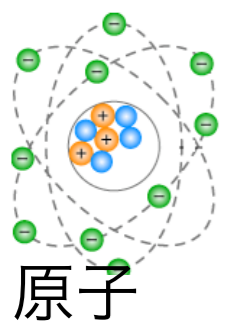
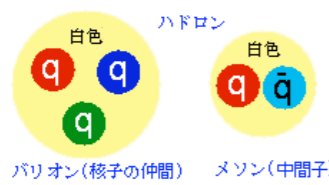
物理学は何を対象とする



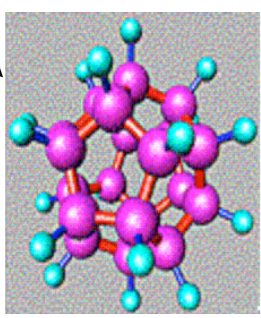
物理学は何を対象とする

ストリング

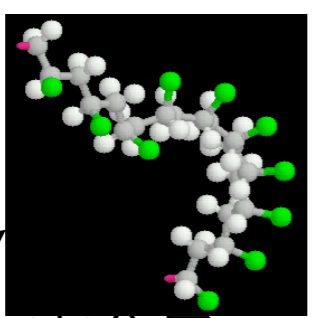
e, μ, τ, ν



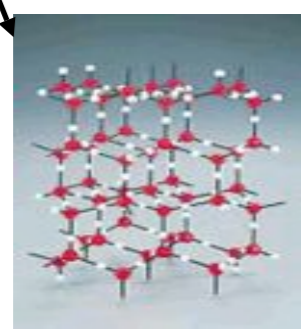
原子



分子



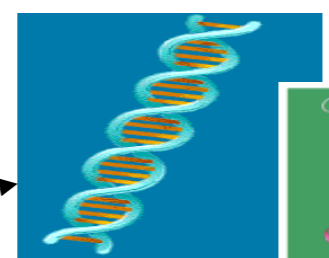
高分子



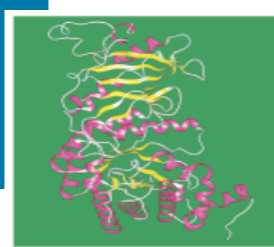
結晶



ガラス



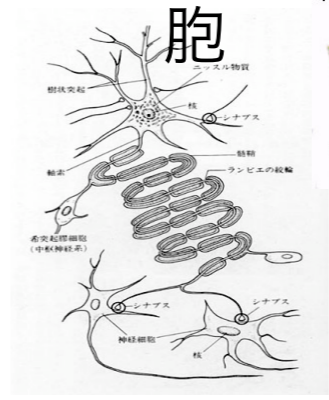
DNA



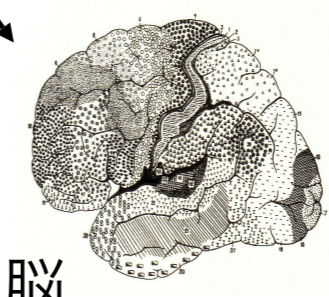
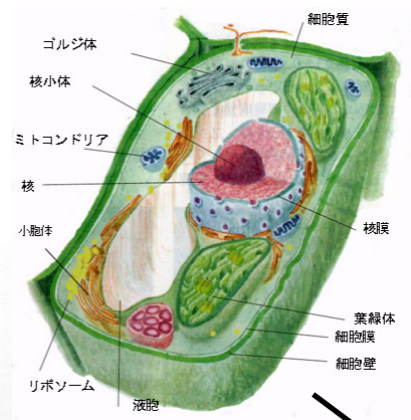
蛋白質



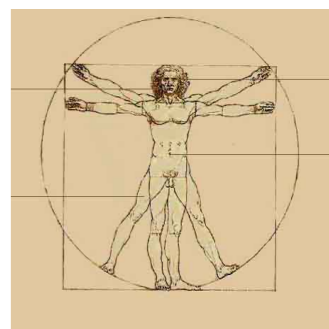
プリン



細胞



脳



人間

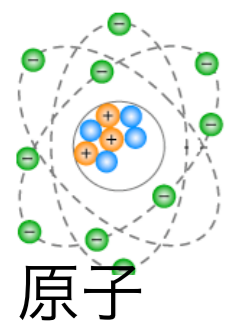
社会

現象

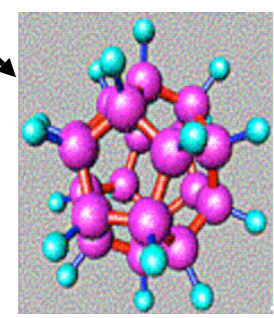
物理学は何を対象とする

“ストリング”

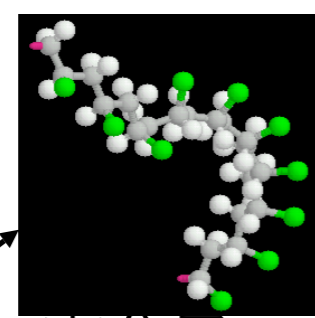

e, μ, τ, ν



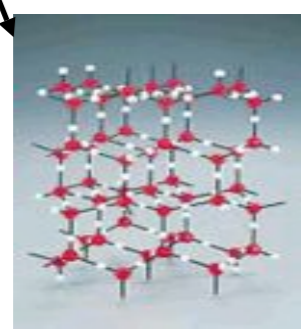
原子



分子



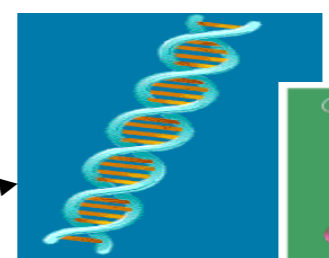
高分子



結晶



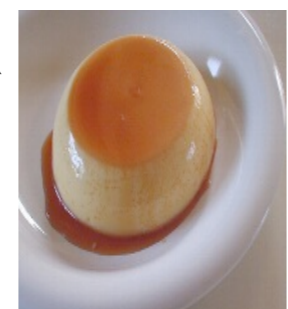
ガラス



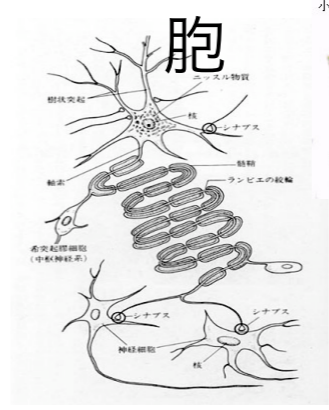
DNA



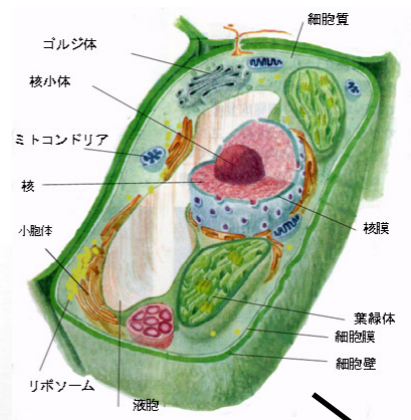
蛋白質



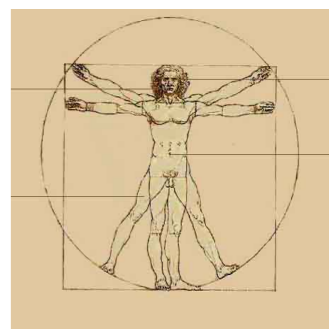
プリン



細胞



脳



人間



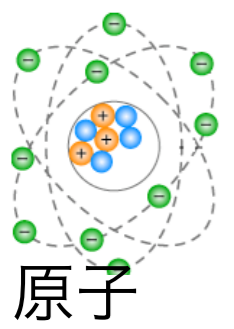
社会

現象

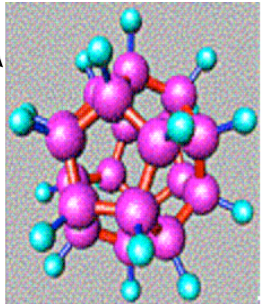
物理学は何を対象とする

ストリング

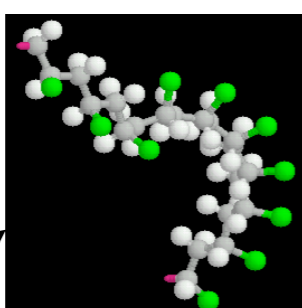
e, μ, τ, ν



原子



分子



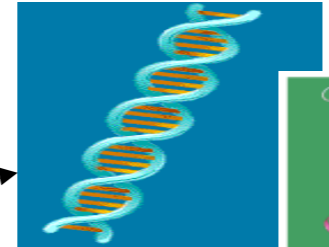
高分子



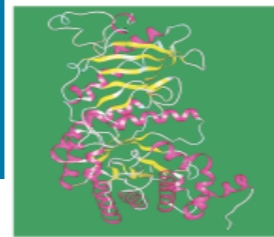
結晶



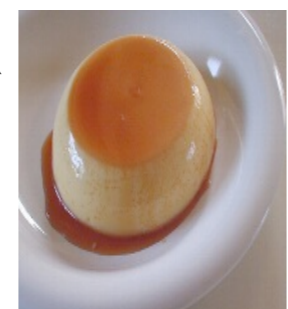
ガラス



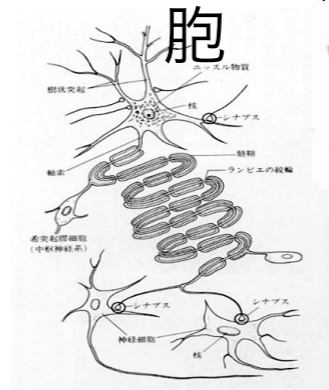
DNA



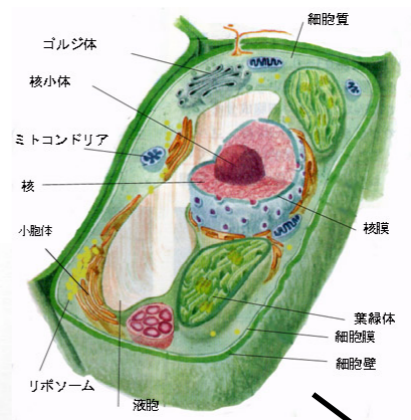
蛋白質



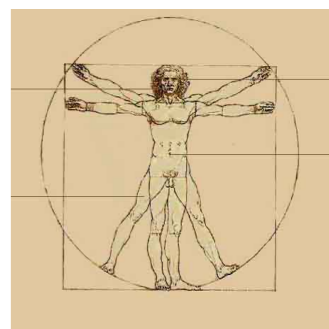
プリン



細胞



脳



人間

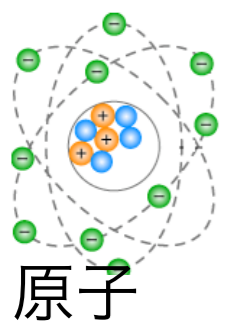


社会
現象

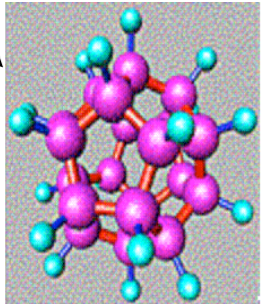
物理学は何を対象とする

“ストリング”

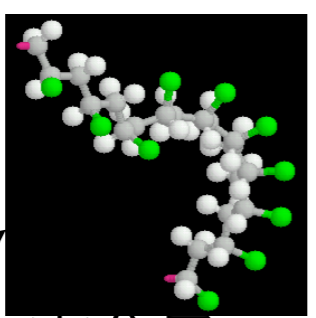

e, μ, τ, ν



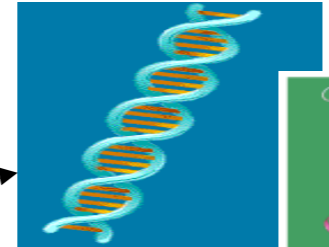
原子



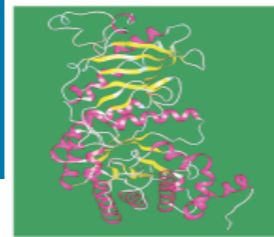
分子



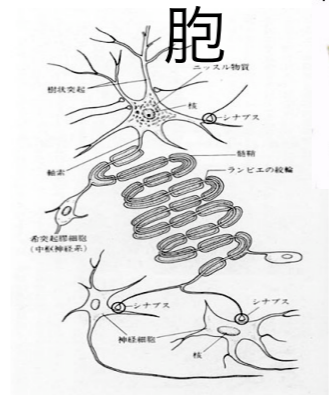
高分子



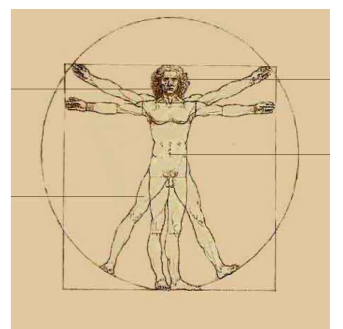
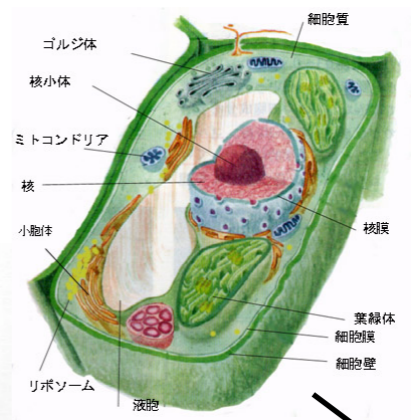
DNA



蛋白質



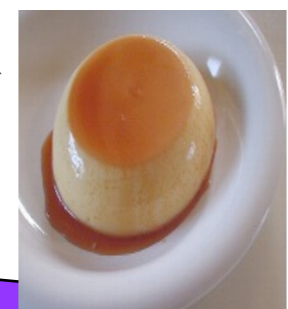
細胞



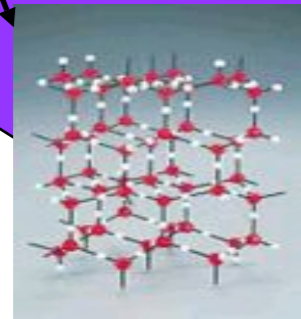
人間



脳



プリン



結晶



ガラス

社会

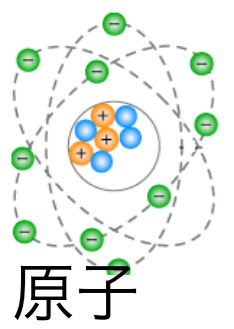
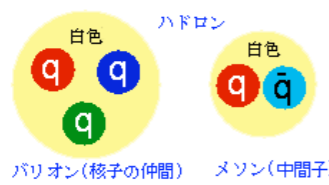
現象



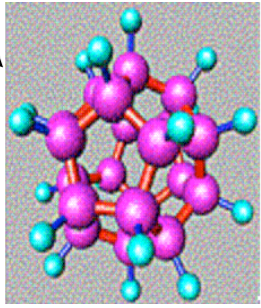
物理学は何を対象とする

“ストリング”

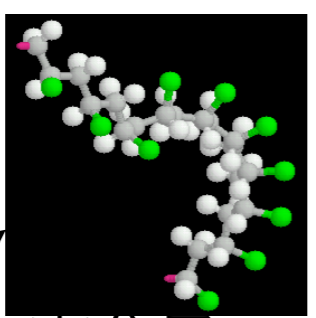

e, μ, τ, ν



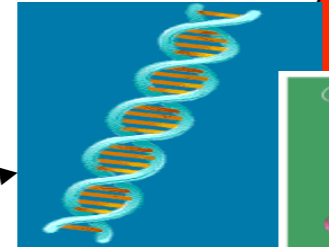
原子



分子



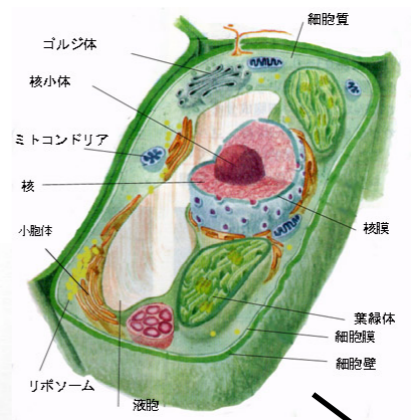
高分子



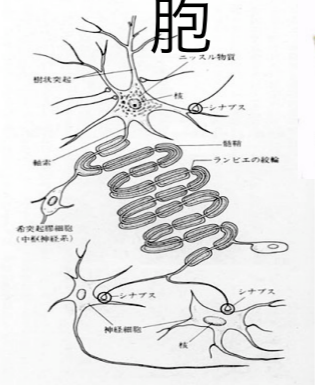
DNA



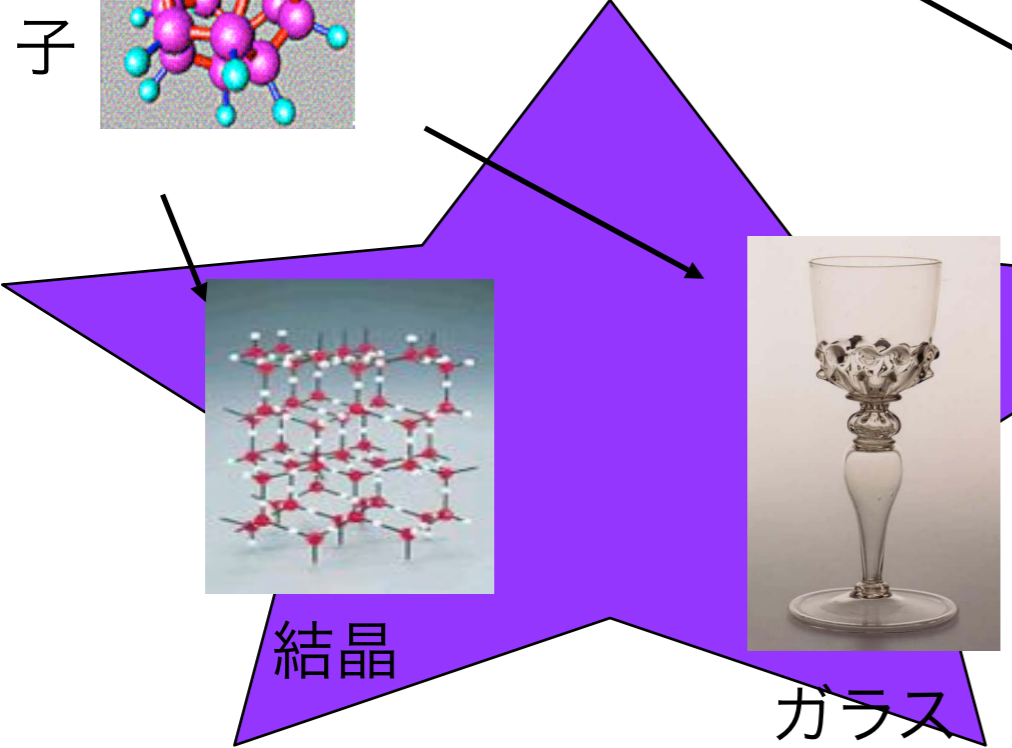
蛋白質



細胞



プリン

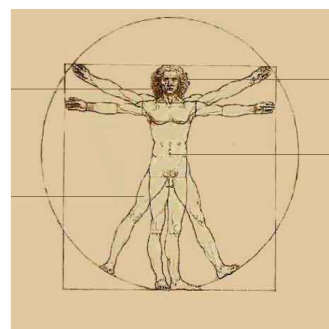


結晶

ガラス



脳



人間



社会
現象

最近の物性理論グループの研究

液体の ダイナミクス

- 溶媒和ダイナミクス
- 分子液体のダイナミクス

- タンパク質の拡散
- 筋肉の周りの水の高速回転

生命現象

- DNAに電流を流す

相転移・ガラス

- 固液の相転移の理論を使ったガラスの研究
- 自由エネルギーランドスケープの研究
- 分子動力学シミュレーションによる研究

社会物理

- つぼモデルの経済現象への応用

最近の物性理論グループの研究

液体の ダイナミクス

- 溶媒和ダイナミクス
- 分子液体のダイナミクス

- タンパク質の拡散
- 筋肉の周りの水の高速回転

生命現象

- DNAに電流を流す

相転移・ガラス

- 固液の相転移の理論を使ったガラスの研究
- 自由エネルギーランドスケープの研究
- 分子動力学シミュレーションによる研究

社会物理

- つぼモデルの経済現象への応用

最近の物性理論グループの研究

液体の ダイナミクス

- 溶媒和ダイナミクス
- 分子液体のダイナミクス

- タンパク質の拡散
- 筋肉の周りの水の高速回転

生命現象

- DNAに電流を流す

相転移・ガラス

- 固液の相転移の理論を使ったガラスの研究
- 自由エネルギーランドスケープの研究
- 分子動力学シミュレーションによる研究

社会物理

- つぼモデルの経済現象への応用

I. 問題意識

非平衡現象における階層構造

平衡系

非平衡(希薄気体)

非平衡(多粒子系)

微視的(ミクロ)
なスケール
(1Å以下、fs)

全ての分子をあらわに含んだ(量子)力学的方程式
分子動力学シミュレーションなど

中間スケール
(数Å~μm
ps ~ ms)

平衡系の
統計力学
(カノニカル
分布等)

ボルツマン
方程式

?

巨視的(マクロ)
なスケール
(mm ~
s ~)

熱力学、流体力学
---> 拡散方程式

固液の相転移の理論を使った
ガラスの研究

クイズ:

ガラスは固体か液体かどちら
でしょう？





クイズ:

ガラスは固体か液体かどちら
でしょう？

答え:

アモルファス固体

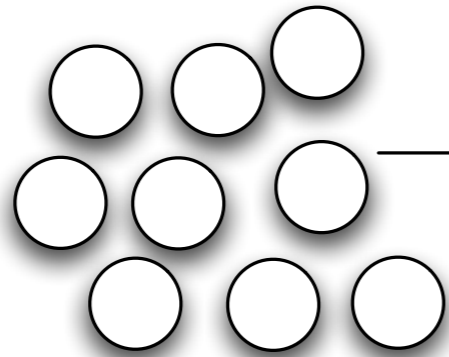
● 固い

液体のように動き回らない。

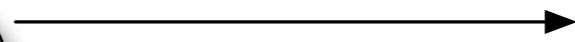
● 結晶のように規則正しく並
ばない。

過冷却現象とガラス転移

液体

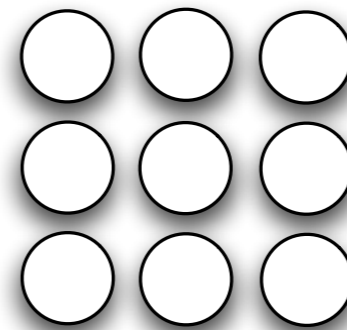


ゆっくり冷やす



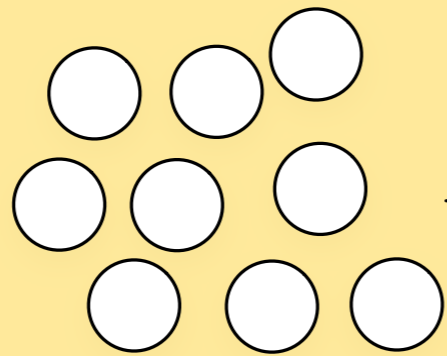
凝固点 T_m

結晶



速く冷やす

過冷却
液体



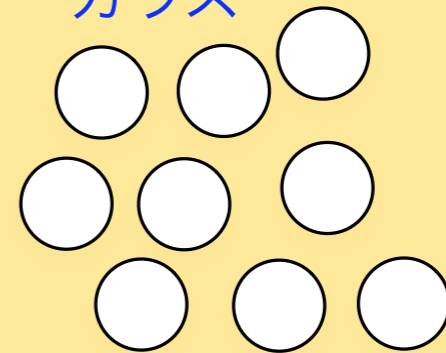
$T < T_m$ でも結晶にならない

T_g : ガラス転移



急に起こる

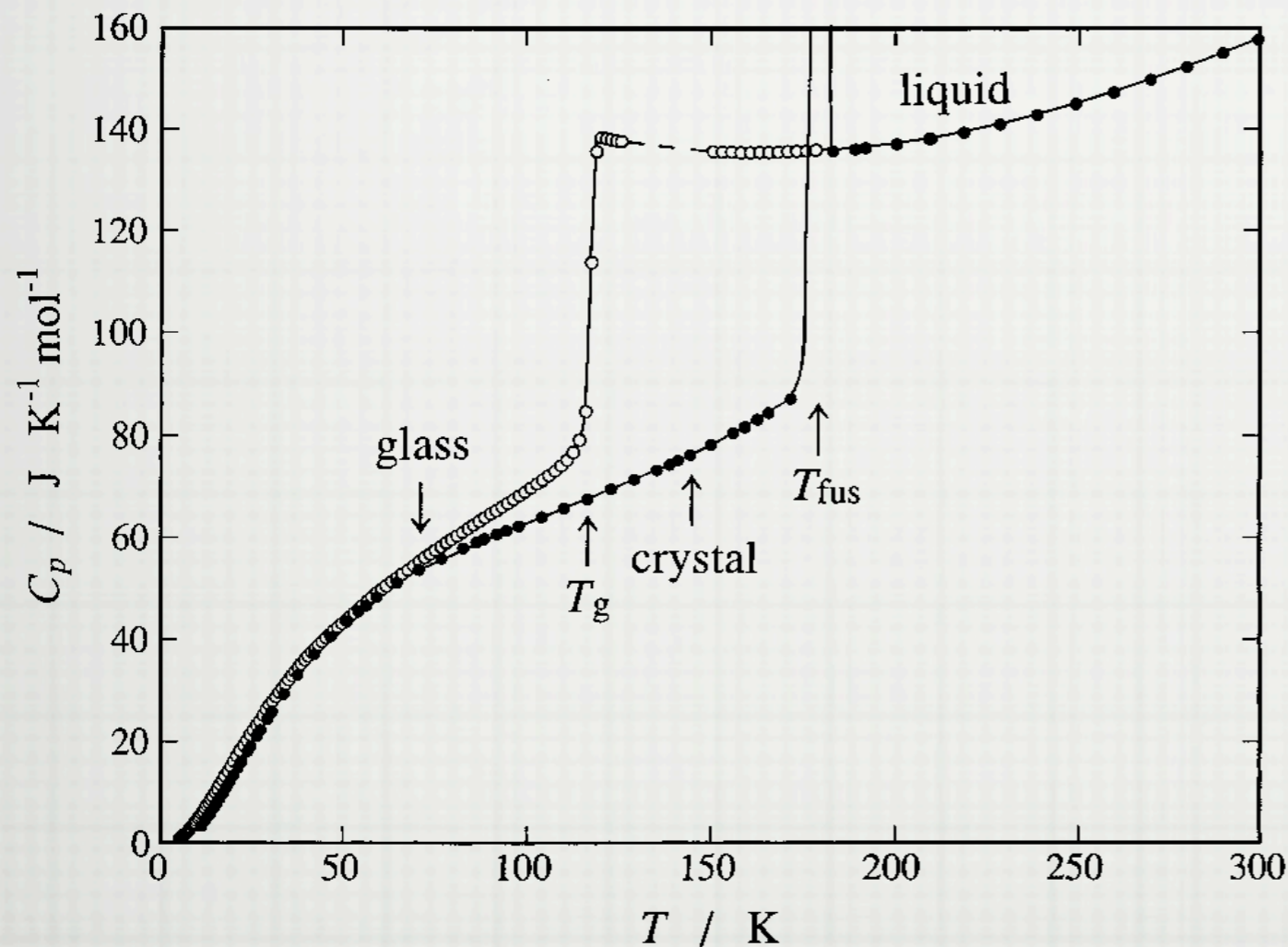
ガラス



不規則に固まる

トルエンの比熱 (Yamamuro ら 1998)

比熱が急激に変化する



ガラス転移の不思議

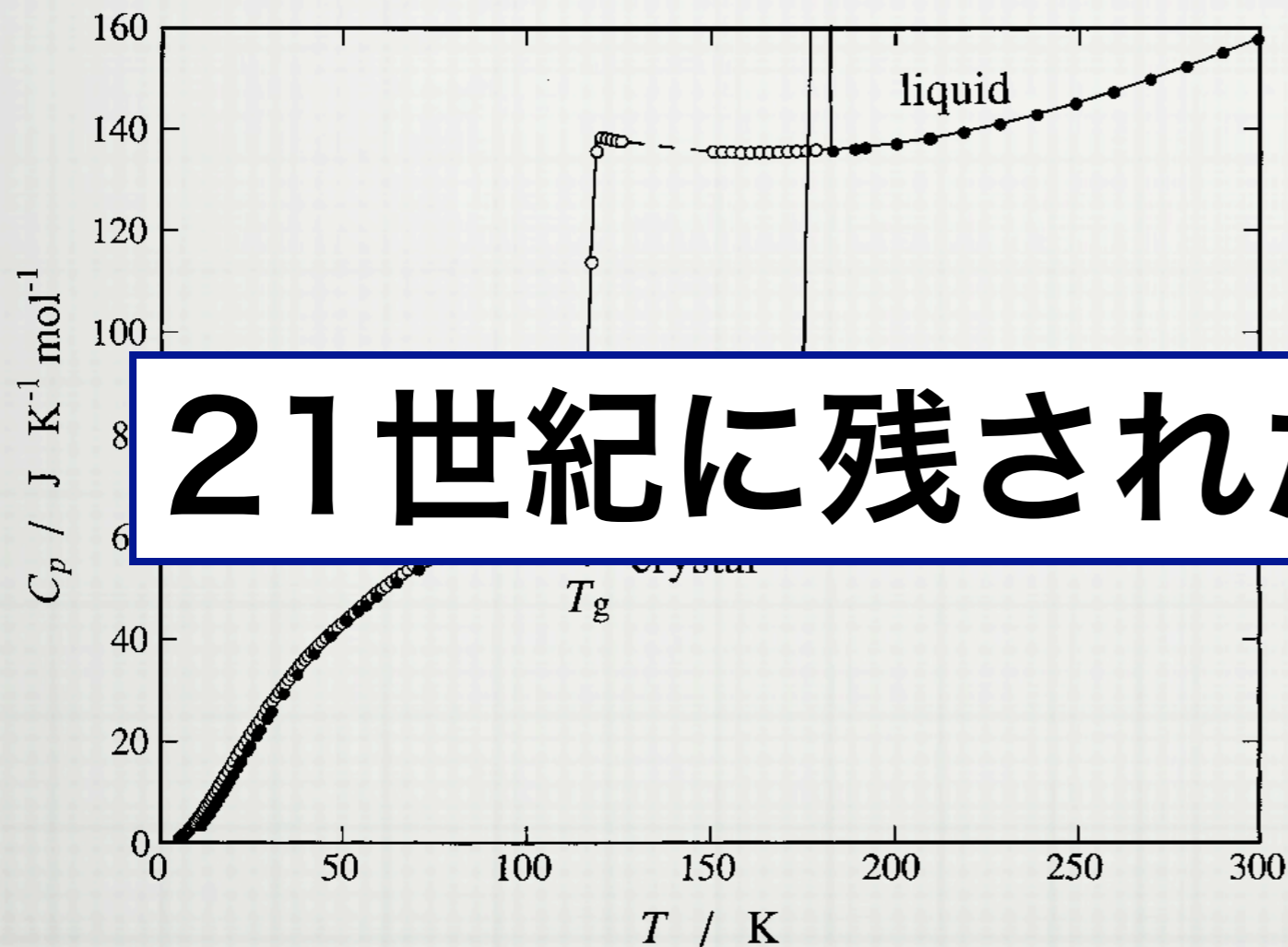
○ 液体 ---> 結晶のような普通の相転移と同じか?

○ そもそも結晶にならないのはなぜか?

21世紀に残された物理学の難問

トルエンの比熱 (Yamamuro ら 1998)

比熱が急激に変化する



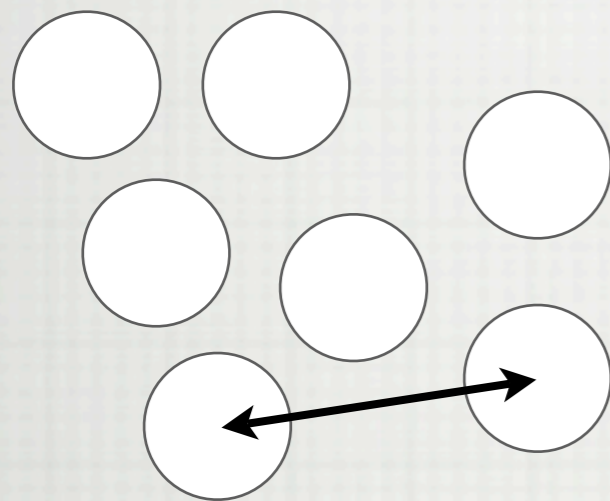
ガラス転移の不思議

21世紀に残された物理学の難問

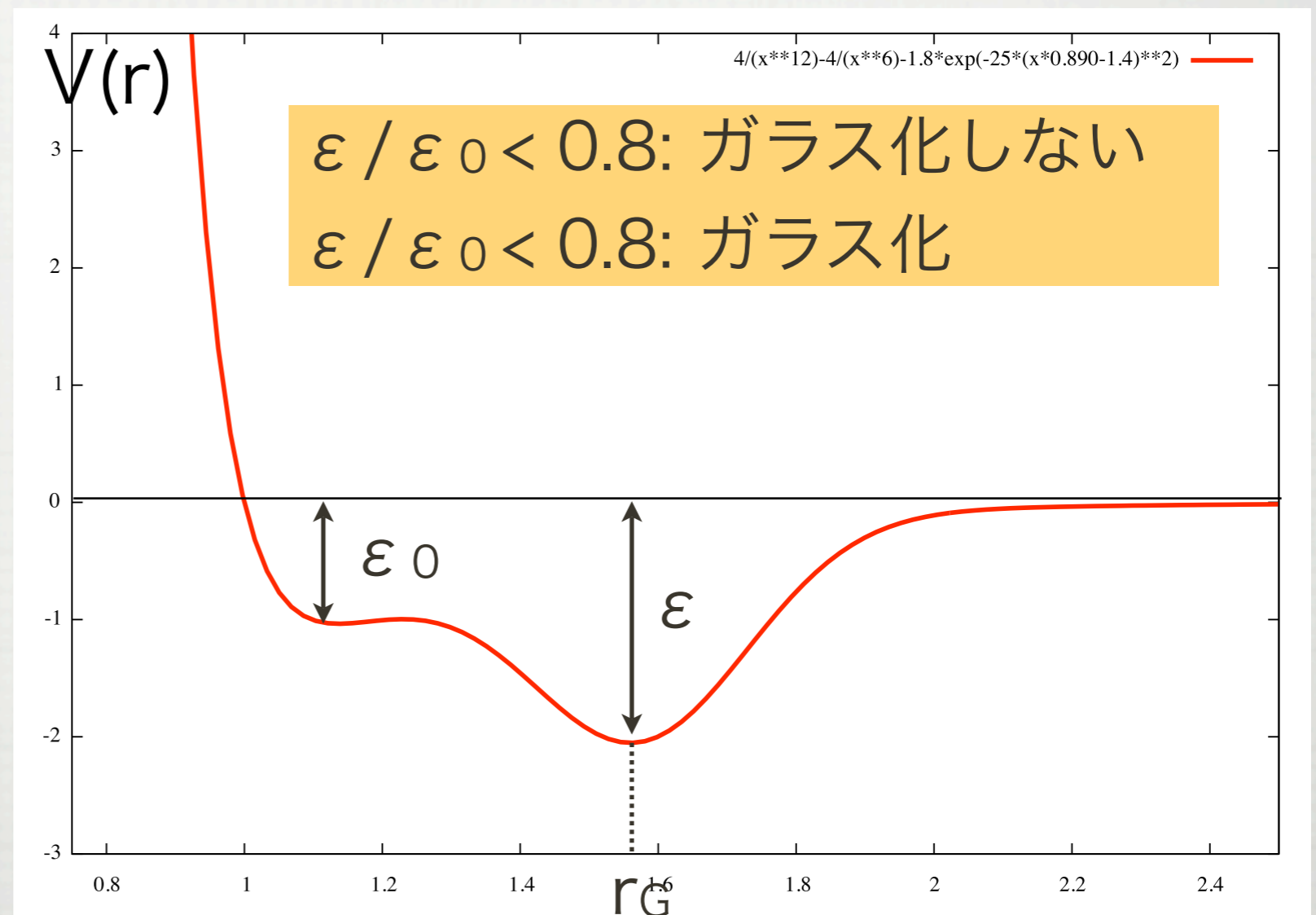
○ そもそも結晶にならないのはなぜか?

レナード・ジョーンズ・ガウスポテンシャル

ここでは、以下の具体的な粒子系を考える。



粒子間ポテンシャル
 $V(r)$



粒子間の距離 r

固液相転移の理論

グランドカノニカル分布

応用

レナード・ジョーンズ・
ガウス粒子系

大分配関数を計算

全部**液体**だと思って

化学ポテンシャル μ_l

圧力 P_l を計算

全部**結晶**だと思って

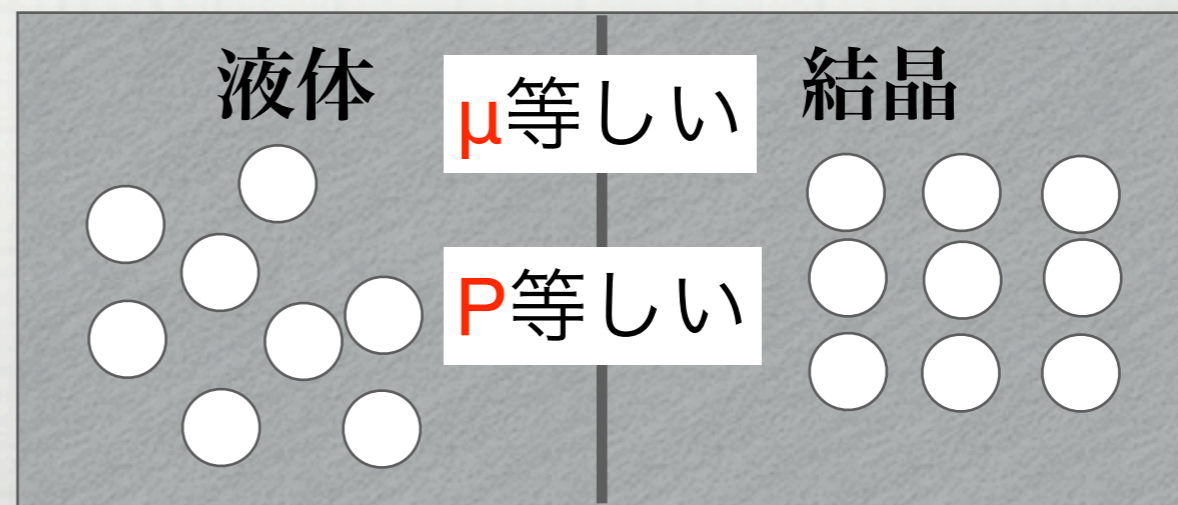
化学ポテンシャル μ_s

圧力 P_s を計算

結晶化がおこる所では

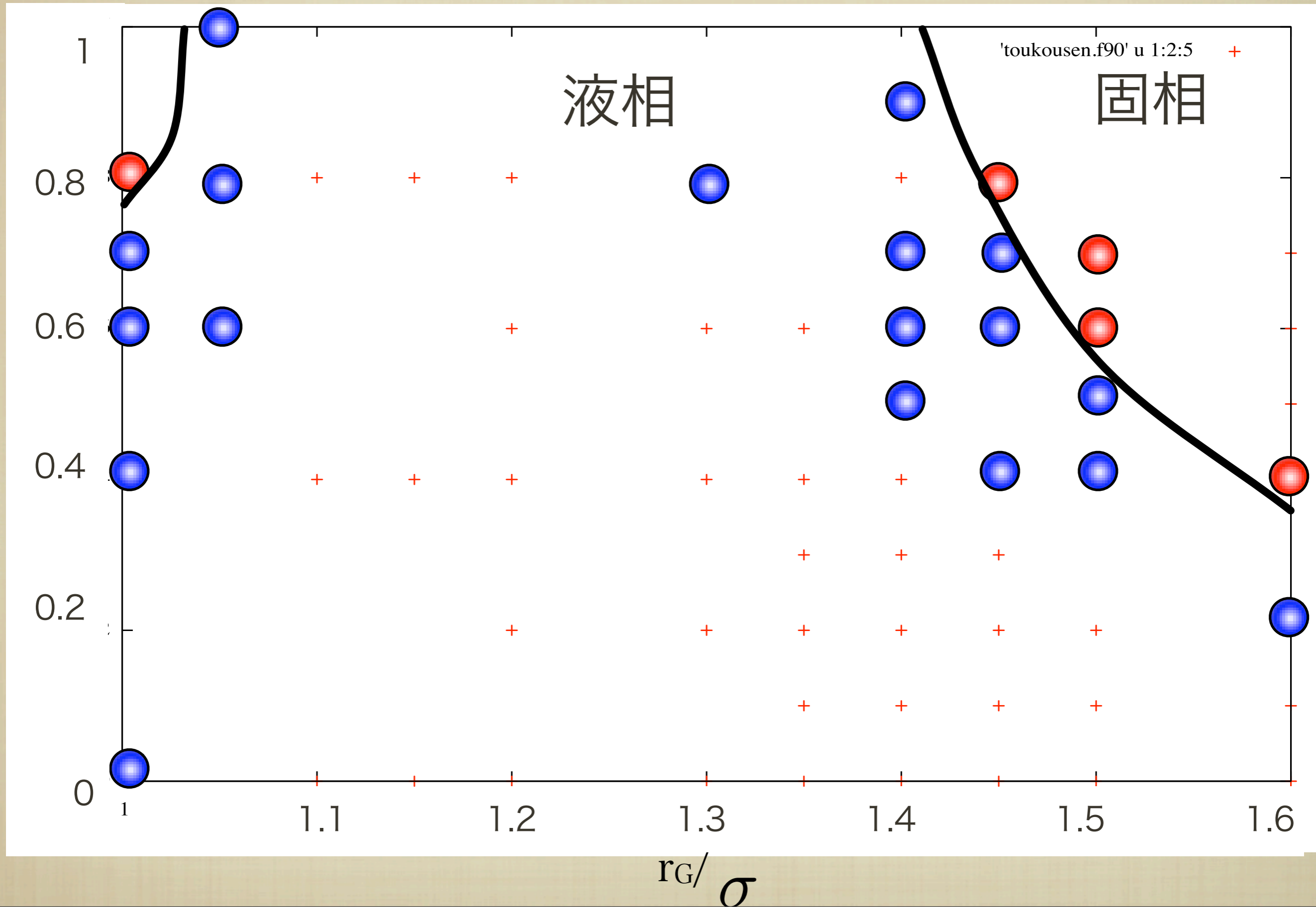
$$\mu_l = \mu_s$$

$$P_l = P_s$$



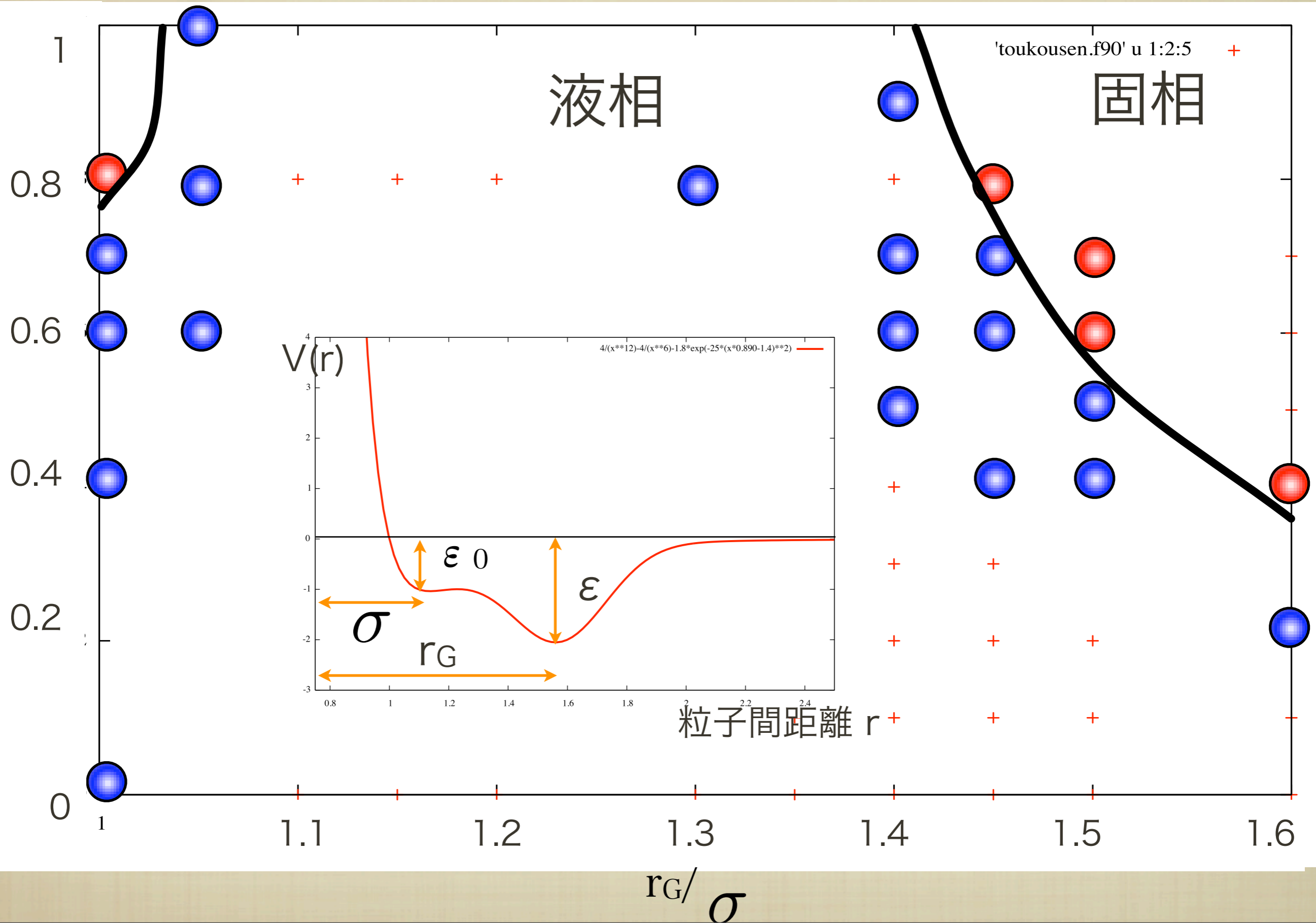
相図

$\varepsilon / \varepsilon_0$

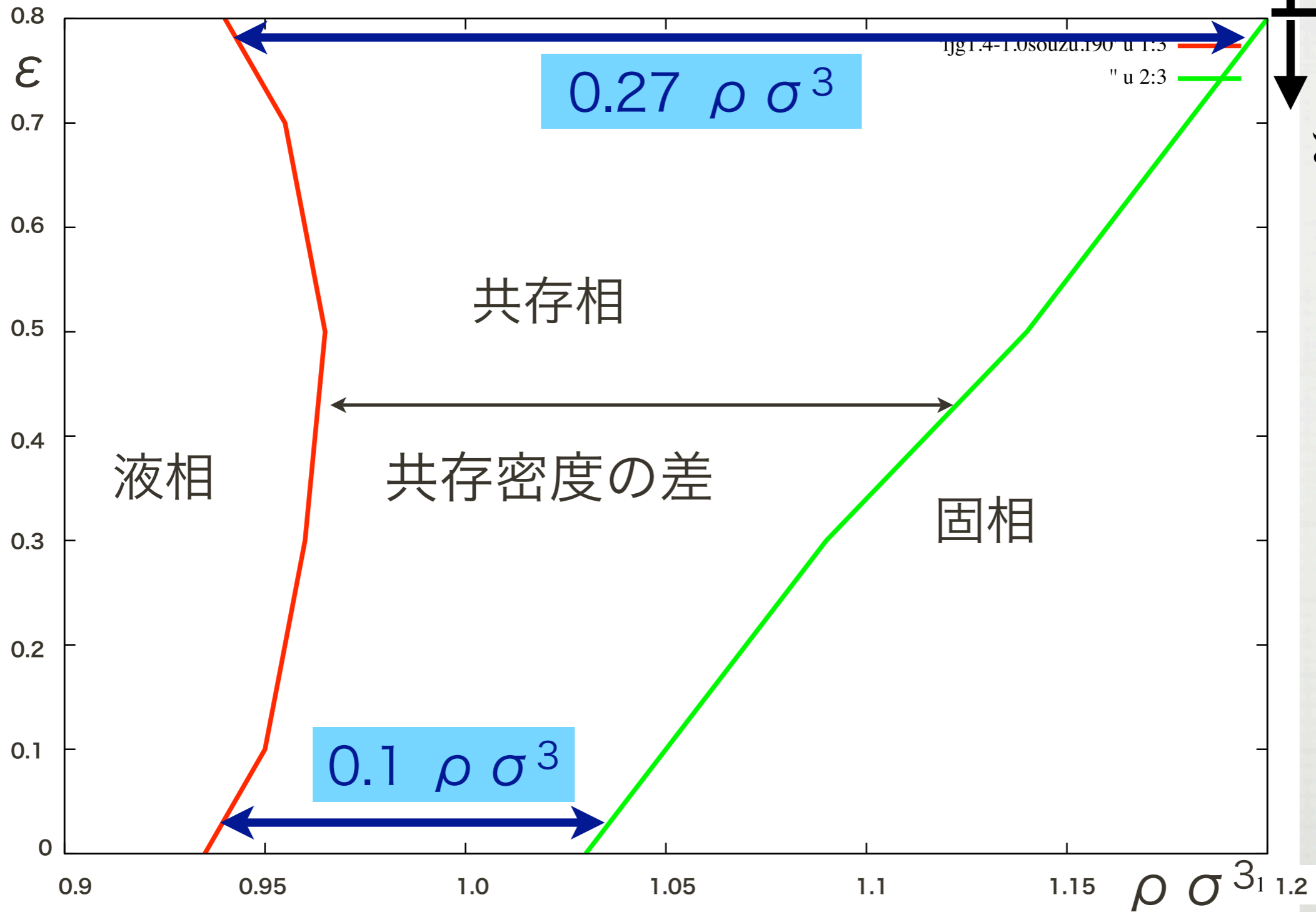


相図

ϵ / ϵ_0



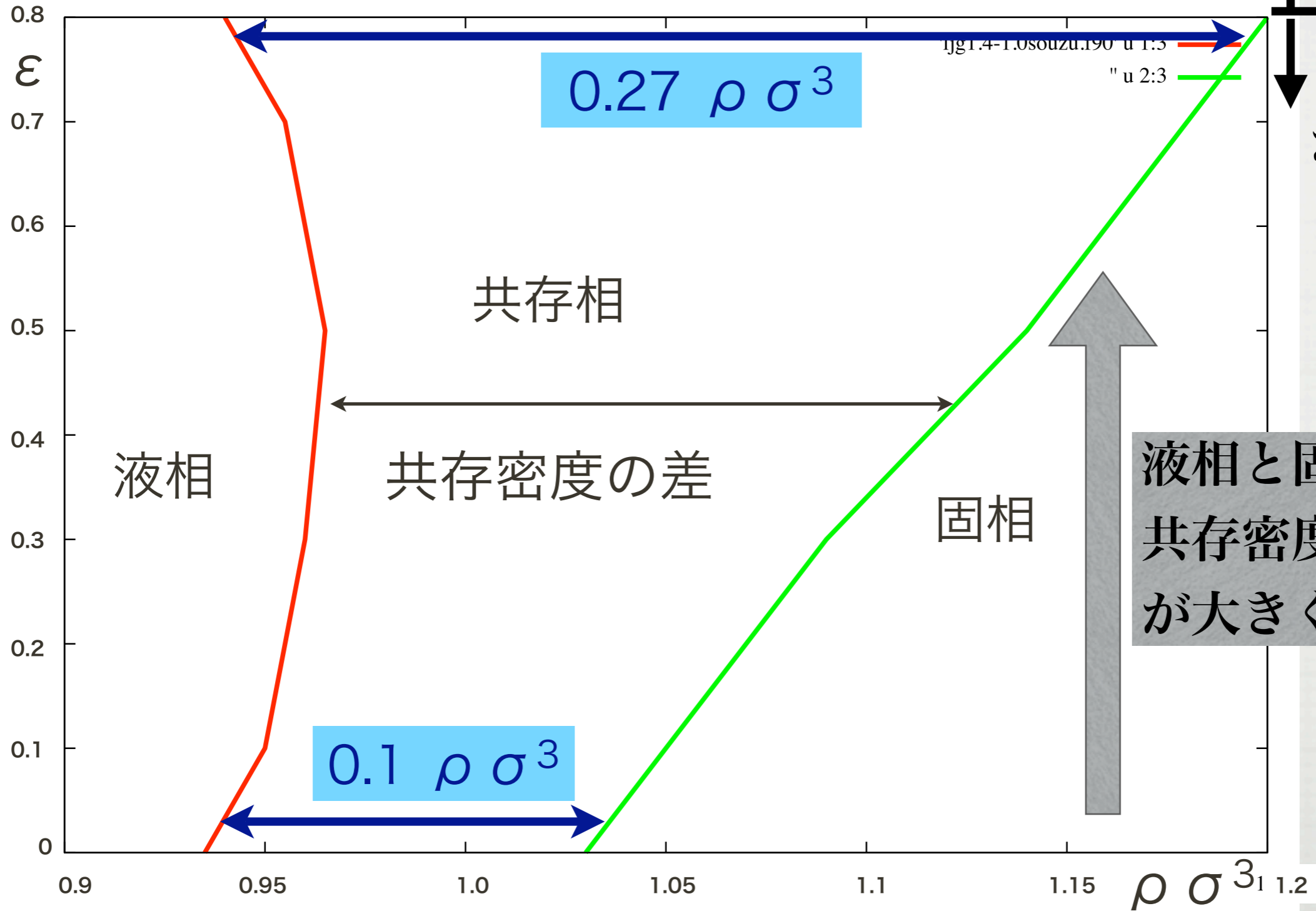
共存密度



↑ ガラス化

↓ ガラス化
が起らない

共存密度



↑ ガラス化
↓ ガラス化
が起らない

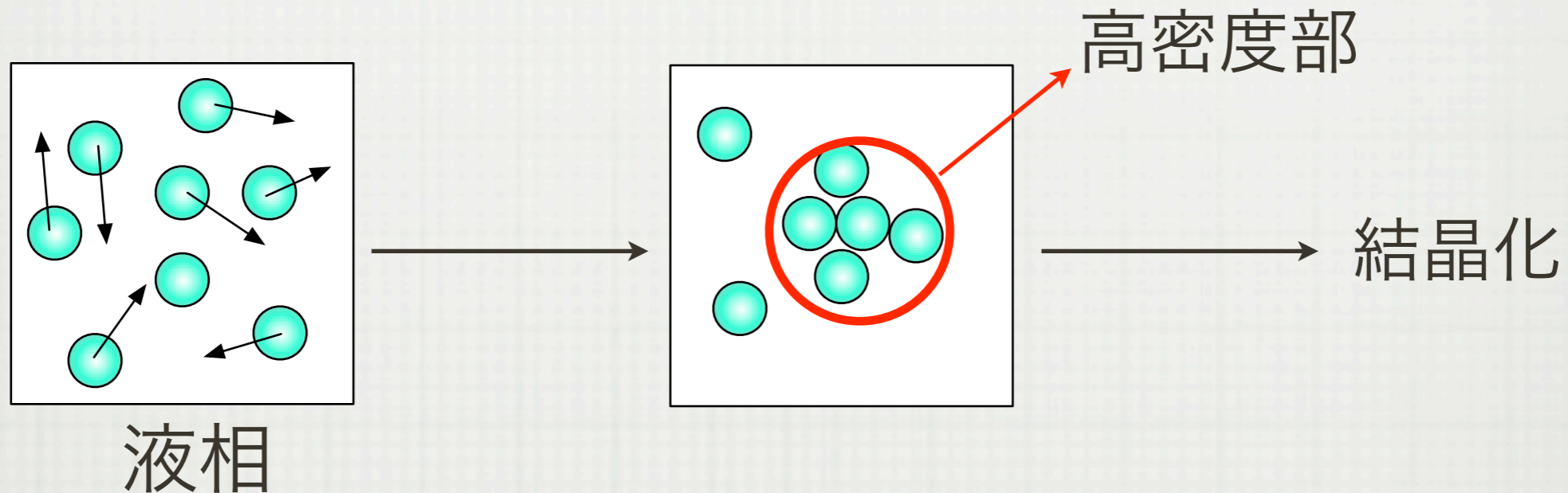
液相と固相の
共存密度の差
が大きくなる

なぜ結晶化しないのか

統計力学の理論

--- 平衡: 結晶化

シミュレーション(現実?) --- 非平衡: ガラス化



密度の高い部分が出来ないと結晶化しない

まとめ

○ ガラス転移はなぜ起きるか？

↑ 研究

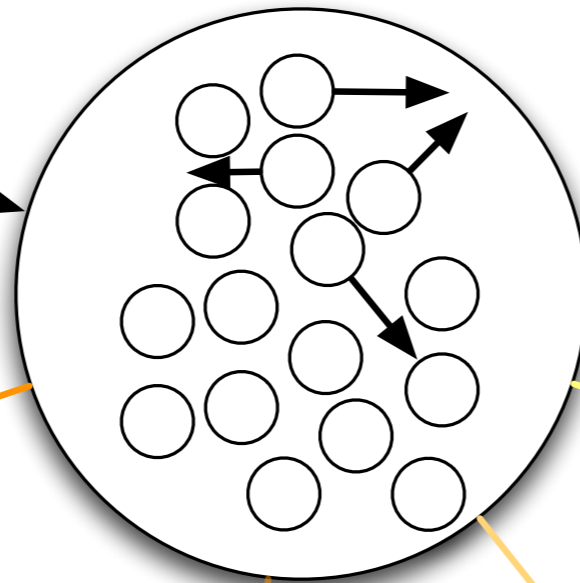
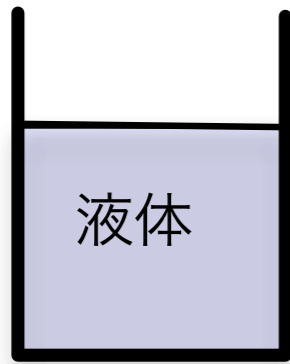
固液相転移の統計力学の理論

○ レナード・ジョーンズ・ガウスポテンシャルの粒子系では
結晶化に大きな密度差が必要 ---> 結晶化が起こりにくい

○ 統計力学のグランドカノニカル分布 ---> ガラス転移
直接結びつく

タンパク質の拡散

液体の特徴と研究の広がり



液体の特徴

- 不規則
- 時間変化が大きい
- 高密度

結晶

気体

粒子間の相関大

化学現象

- 化学反応
- 溶解現象
- 分光

生命現象

- 生体分子の機能
 - 構造変化
- ほとんどの生命現象は水の中で起こる

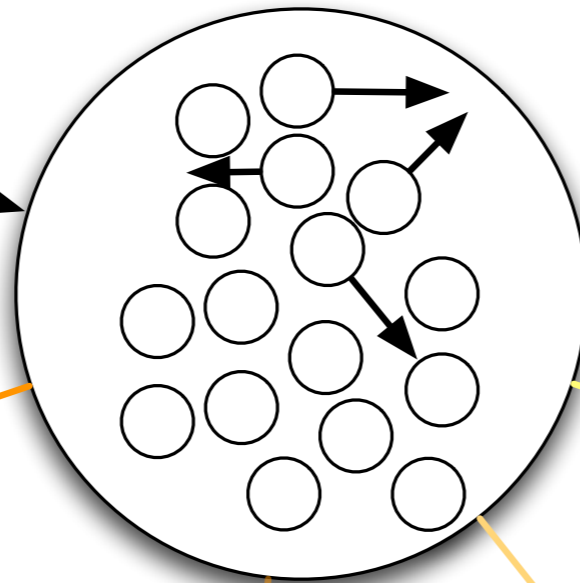
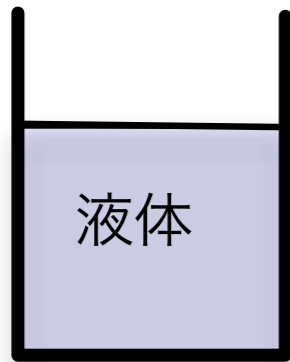
ソフトマター

- コロイド、ゲル等の塩効果、溶媒効果等。

物理学の基礎的な問題

- 非平衡統計力学
- 多自由度系の量子過程
- 量子液体

液体の特徴と研究の広がり



液体の特徴

- 不規則
- 時間変化が大きい
- 高密度

結晶

気体

粒子間の相関大

化学現象

- 化学反応
- 溶解現象
- 分光

生命現象

- 生体分子の機能
 - 構造変化
- ほとんどの生命現象は水の中で起こる

ソフトマター

- コロイド、ゲル等の塩効果、溶媒効果等。

物理学の基礎的な問題

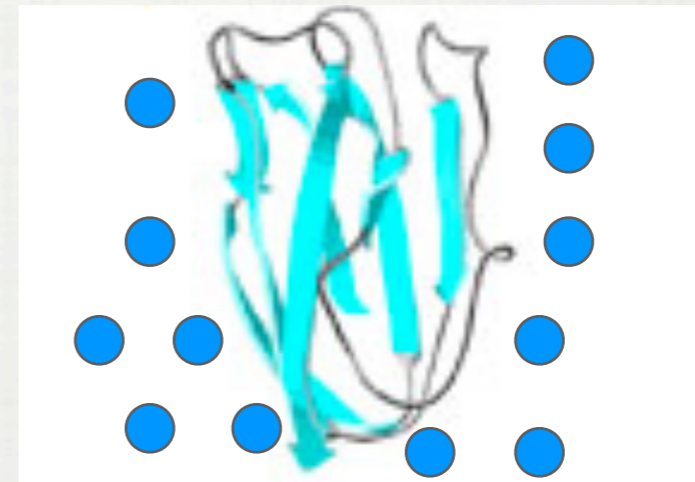
- 非平衡統計力学
- 多自由度系の量子過程
- 量子液体

生命現象と水

ほとんどの生命現象は水中で起こる

大腸菌細胞中の成分組成

	重量%	分子数/細胞	種類
水	70	400億	1
タンパク質	15	800万	~3000
多糖	3		5
核酸 (DNA,RNA)	7		>3000
無機イオン	1		20



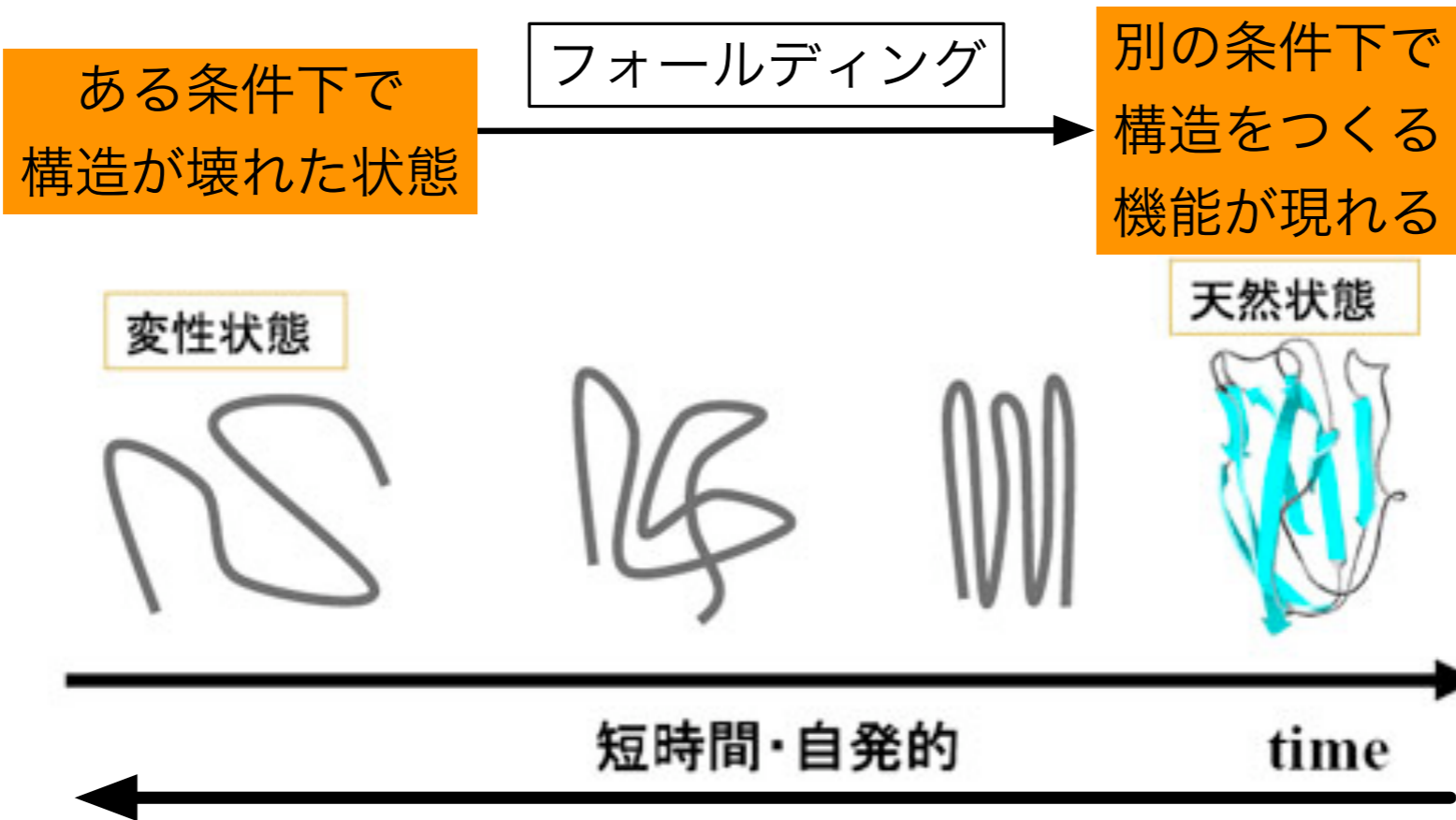
タンパク質の
ダイナミックス

どう影響
しているか

水

ここでは特に
タンパク質の拡散に注目

タンパク質のフォールディング



京都大学馬殿HP <http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/hikari/baden/pc.html>

タンパク質がどのようにフォールディングするか
活発に研究されている

拡散とフォールディング

タンパク質を水中で拡散させる

構造が壊れた状態 (大きい)

変性状態



拡散しにくい
拡散係数小

構造をつくった状態 (小さい)

天然状態



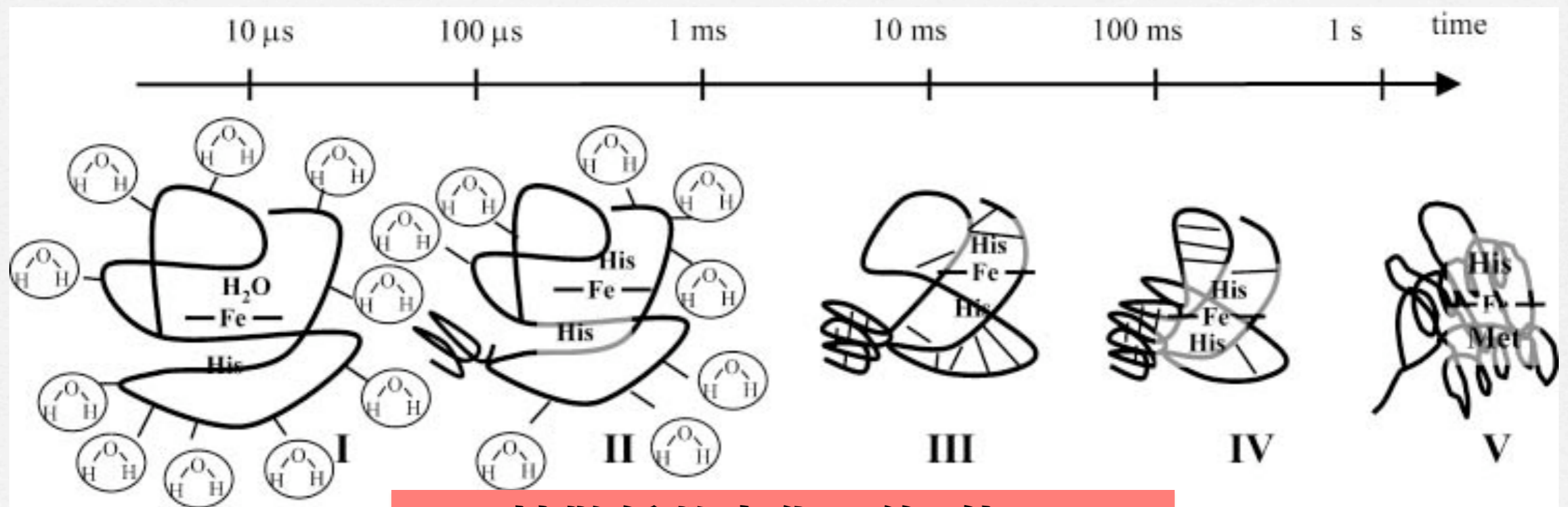
拡散しやすい
拡散係数大

拡散係数の
時間変化を測れば
フォールディング
の様子がわかる

IV. タンパク質への応用

タンパク質の拡散の実験

チトクロムcが折れたたまる時、
それぞれの段階で拡散係数を測定 (西田ら2004)



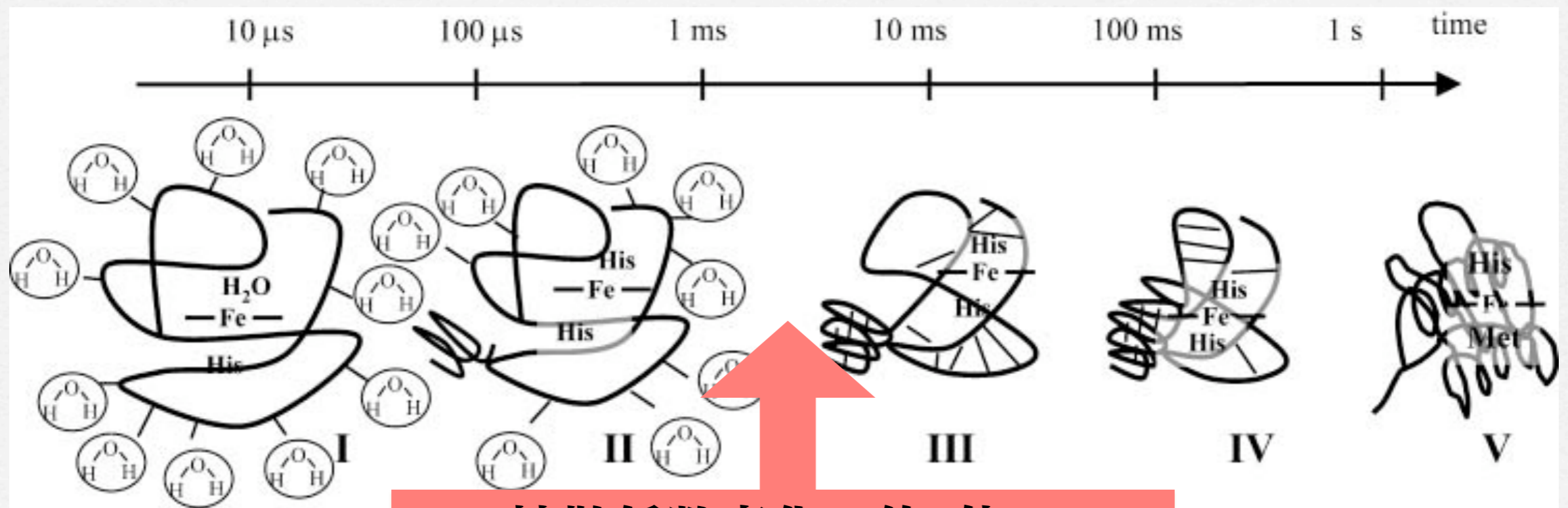
拡散係数変化。約2倍に

- 大きく変化した時間 \neq 大きさが変わる時間
- 水素結合が重要?

IV. タンパク質への応用

タンパク質の拡散の実験

チトクロムcが折れたたまる時、
それぞれの段階で拡散係数を測定 (西田ら2004)

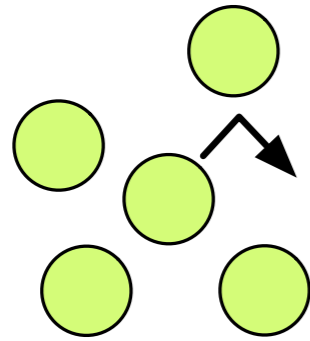
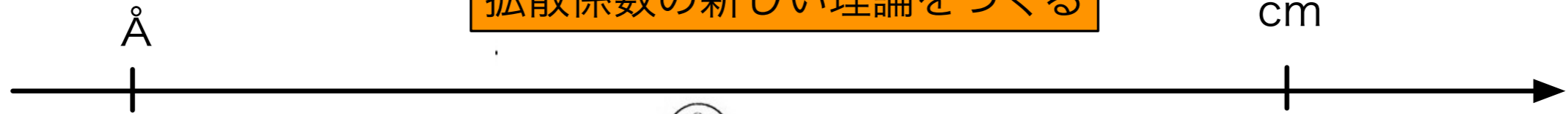


拡散係数変化。約2倍に

- 大きく変化した時間 \neq 大きさが変わる時間
- 水素結合が重要?

研究の目的

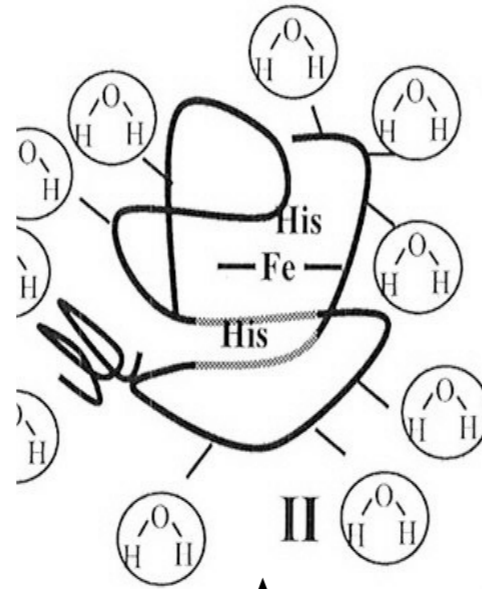
拡散係数の新しい理論をつくる



微視的な理論

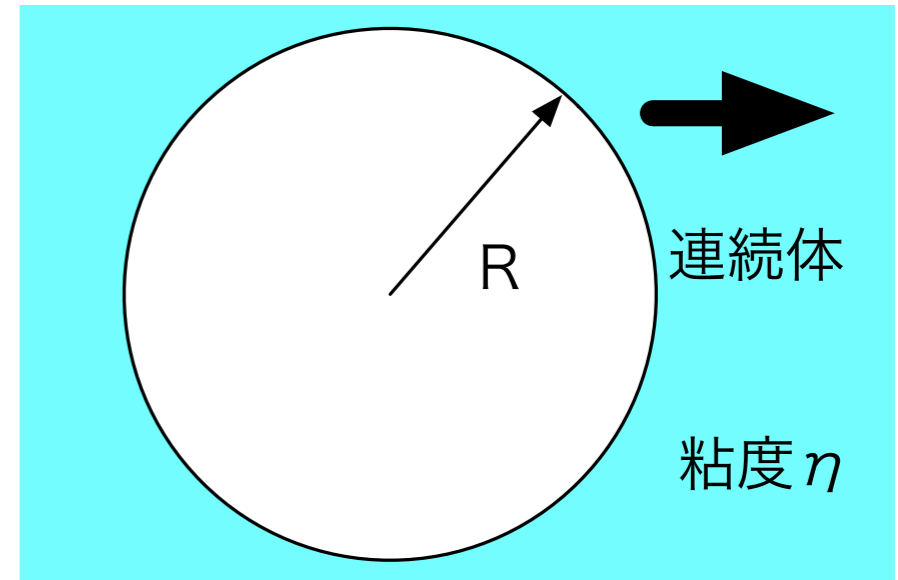
動的密度汎関数法
分子動力学
シミュレーション

- 液体分子との相関をあらわに含む
- 計算複雑



ここを研究できる理論

- 液体分子との相関をあらわに含む
- 計算簡単



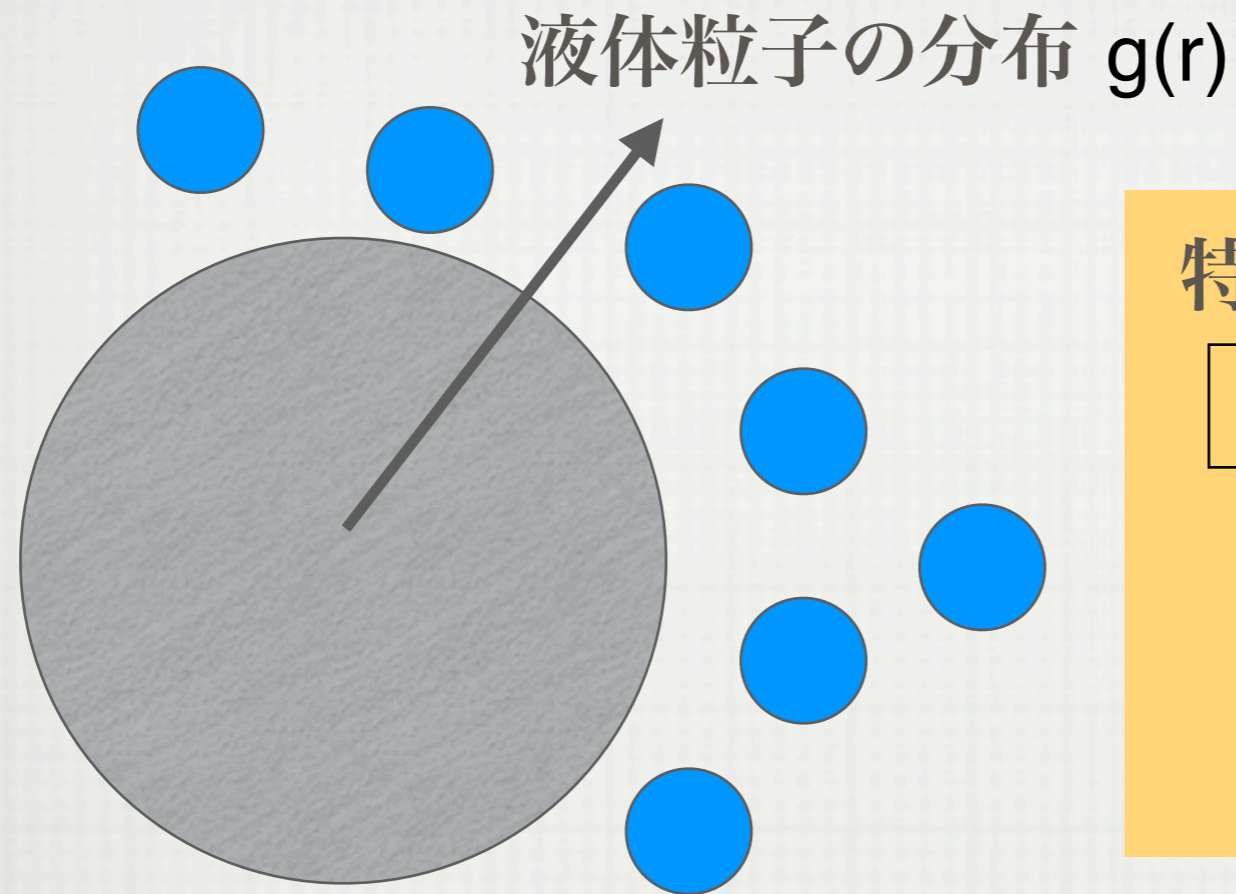
巨視的な理論

Stokes Einstein 則

$$D \propto k_B T / (R \eta)$$

- 計算簡単、多くの研究
- 液体分子との相関含まない
溶質の大きさRだけ

理論の概要



特徴

液体粒子の分布 $g(r)$

計算できる

拡散係数

ポイント

液体粒子の半径/拡散する粒子の半径 $\ll 1$

として摂動展開

計算式

$$\text{拡散係数 } D = \frac{D_0}{1 + \Delta a}, \quad \Delta a = \frac{1}{2}\alpha_1 - \beta$$

D_0 : 液体粒子の半径 $\rightarrow 0$ の時の D の値 (簡単に計算できる)

$$\alpha_1 = -\frac{1}{R} \int_R^\infty dr \left\{ \Delta v(r) - g(r) \int_r^\infty \frac{w'(r')}{g(r')} \Delta v(r') dr' \right\},$$

$$\beta = \frac{1}{R} \int_R^\infty h(r) dr,$$

$$\Delta v(r) = \frac{2}{g(r)} w'(r) \int_R^r g(r') dr'$$

$$h(r) = g(r) - 1, \quad w'(r) = \frac{1}{g(r)} \frac{dg(r)}{dr}$$

$g(r)$: 液体粒子の分布

計算式

$$\text{拡散係数 } D = \frac{D_0}{1 + \Delta a}, \quad \Delta a = \frac{1}{2} \alpha_1 - \beta$$

D_0 : 液体粒子の半径 $\rightarrow 0$ の時の D の値 (簡単に計算できる)

$$\alpha_1 = -\frac{1}{R} \int_R^\infty dr \left\{ \Delta v(r) - g(r) \int_r^\infty \frac{w'(r')}{g(r')} \Delta v(r') dr' \right\},$$

$$\beta = \frac{1}{R} \int_R^\infty h(r) dr,$$

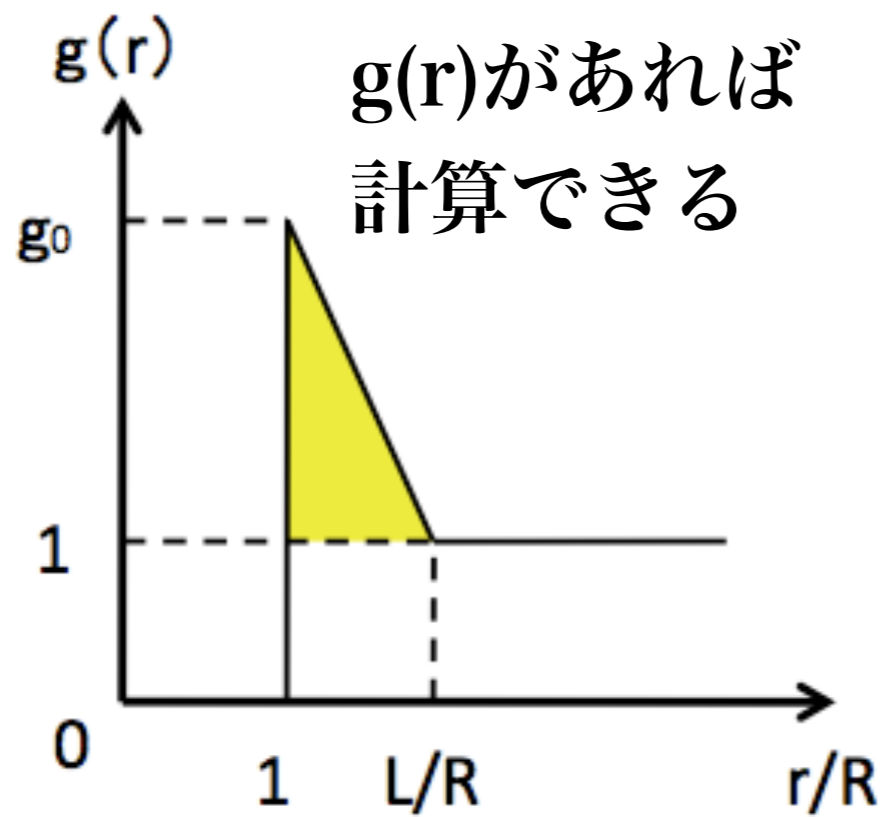
$$\Delta v(r) = \frac{2}{g(r)} w'(r) \int_R^r g(r') dr'$$

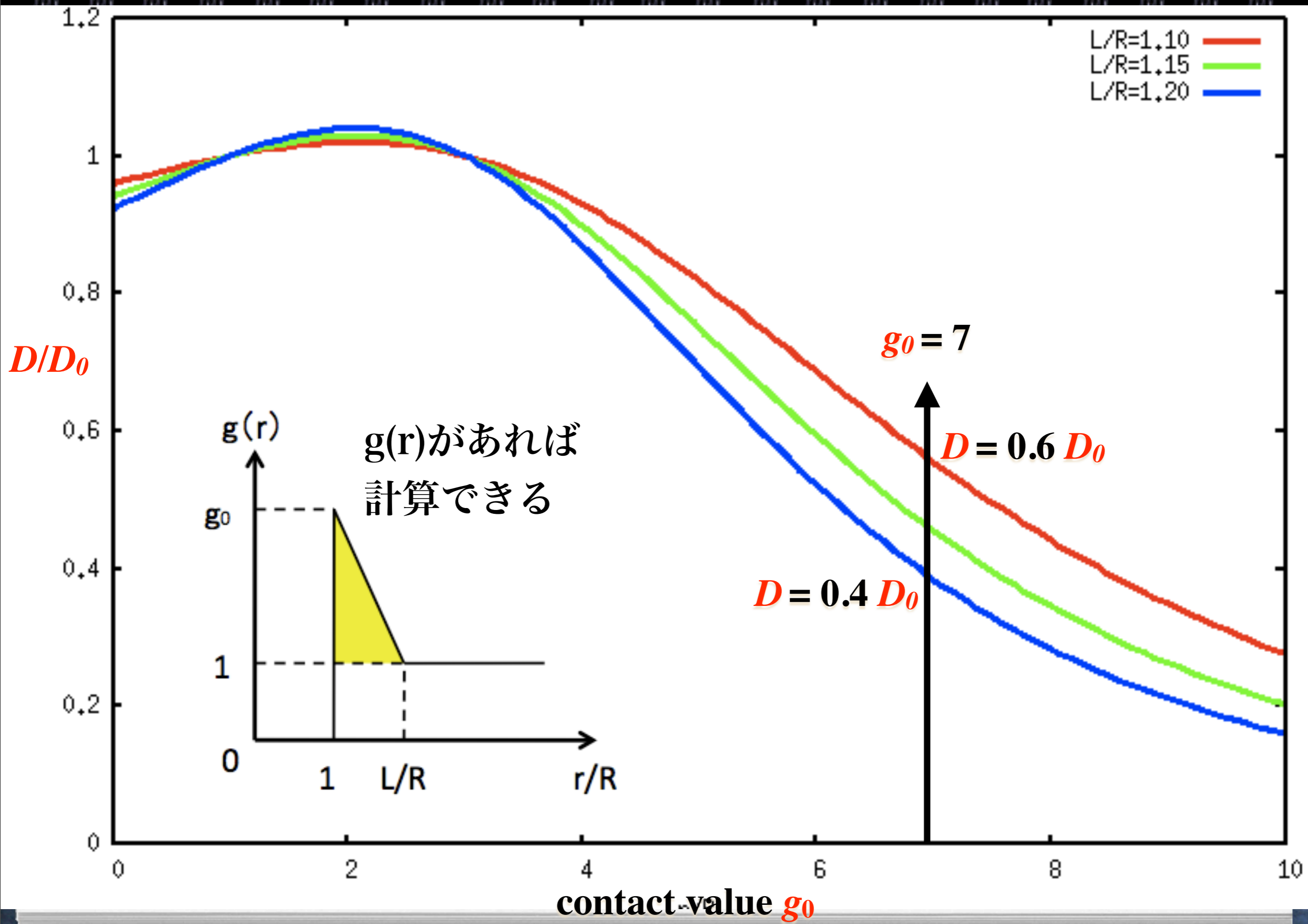
$$h(r) = g(r) - 1, \quad w'(r) = \frac{1}{g(r)} \frac{dg(r)}{dr}$$

$g(r)$: 液体粒子の分布

III. 結果

モデル液体の計算





実験を説明するには

拡散係数

実験結果: フォールディングする前
した後

Du

$$D_u/D_f = 0.5$$

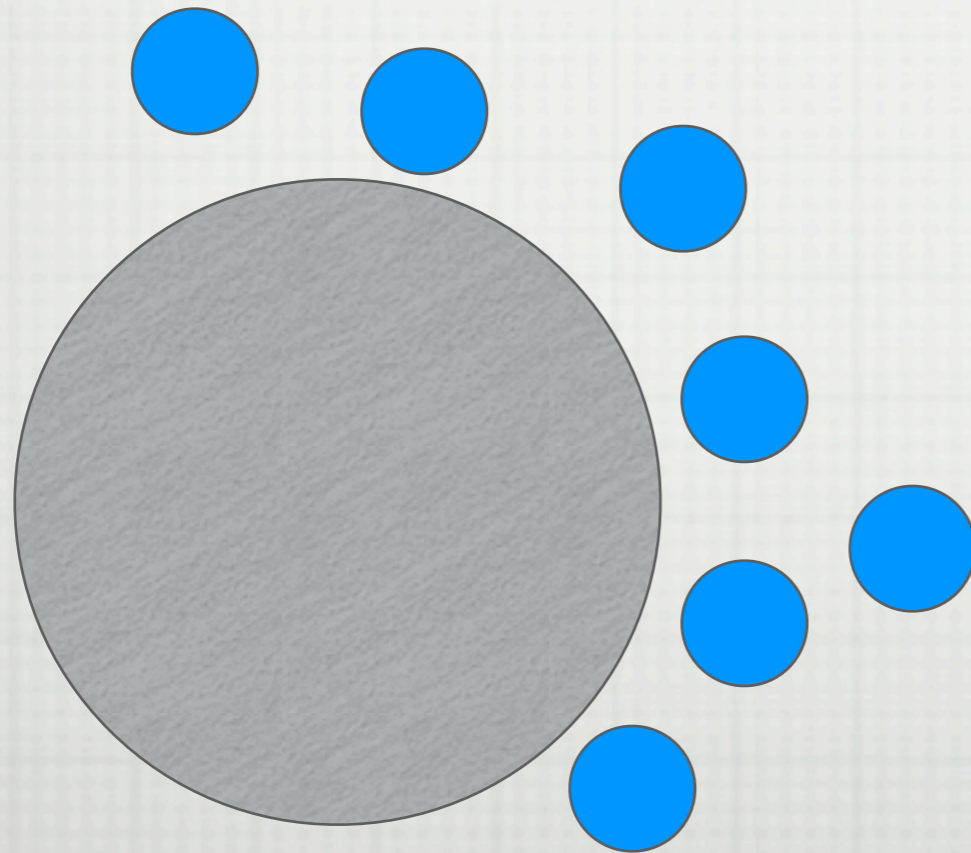
Df

計算結果: $g_0 = 1$
 $g_0 = 7$

D1

$$D_7/D_1 = 0.5$$

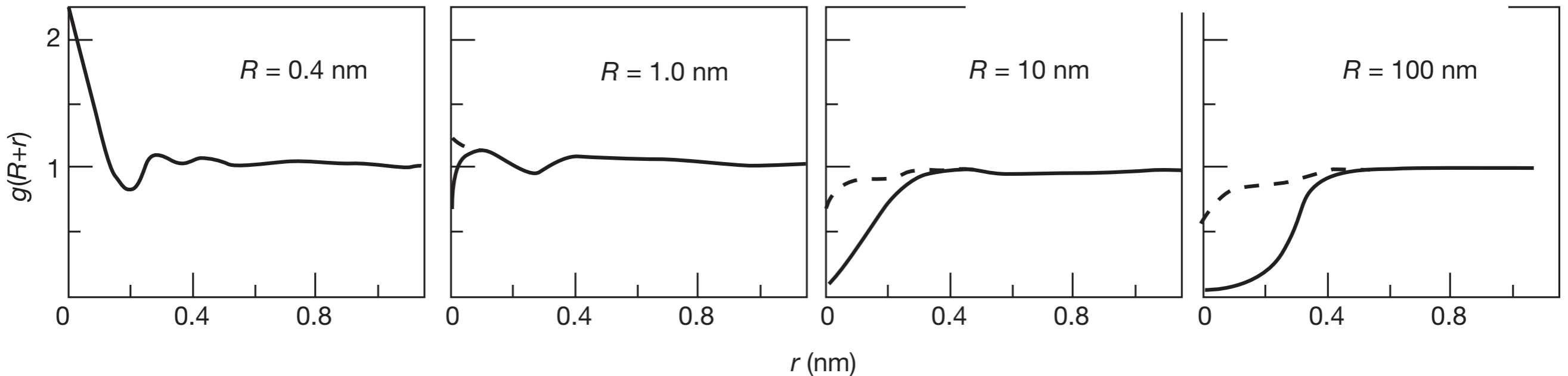
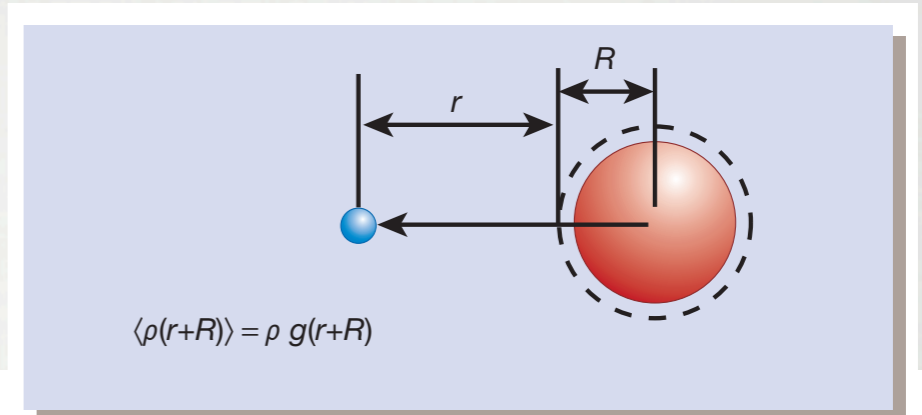
D7



つまり、
タンパク質のまわりの水分子が
フォールディングする前/した後
= 7倍違えば良い

蒸発現象

剛体球のまわりの水分子 (Chandler 2005)



大きい剛体球のまわりには水分子があまりいない(蒸発?)

フォールディングした後のタンパク質に同じことが起これば、

実験が説明できる: フォールディング前

$$g_0 = 7$$

後 (蒸発)

$$g_0 = 1$$

$$D7/D1 = 0.5$$

まとめ

- 生命現象 ← 水
役割
今回はタンパク質の拡散

- 水の分布 → 拡散係数
計算

理論をつくった

わかったこと：拡散の実験



関係明らかに

水の以上な分布

- 理論の特徴

微視的なスケール ↔ 巨視的なスケール

中間のスケールの理論