

### G-1 Duffing 振動子系の長時間領域における相関関数

佐大医<sup>A</sup>, 九大応力研<sup>B</sup>, 福岡県立大<sup>C</sup>, 九州看護福祉大<sup>D</sup>, 福岡女子大<sup>E</sup> 富永広貴<sup>A</sup>,  
森肇<sup>B</sup>, 石崎龍二<sup>C</sup>, 森信之<sup>D</sup>, 黒木昌一<sup>E</sup>

カオスを示す力学系の軌道は短い timescale では決定論的で予測可能であるが、長い timescale ではカオスの軌道不安定性のため stochastic で random になる (カオスの 2 重性)。このカオス軌道の random 化は散逸力学系の場合は外力により供給されたマクロな運動エネルギーのカオスによる random な運動エネルギーへの散逸を生み出し、強制振子や Duffing 振動子のカオス誘導摩擦や乱流における乱流粘性など、様々な輸送現象を示すことが予測される。

我々は、散逸系カオスを示す最も簡単な力学系である Duffing 振動子に対して、森の射影演算子法に従い、集団振動数  $\Omega_0$  と記憶関数  $\gamma(t)$  を導入して線形発展方程式を導いた。この記憶関数の特性時間がマクロな変数の特性時間と比べて非常に小さい場合は、カオスによるランダムネスは急速に減衰し記憶関数の項は定数とみなすことができ、長時間領域では、マルコフ過程と同様に、マクロ変数の時間相関関数は指数型減衰をしめす。ところが、我々が扱ったパラメータ領域では、記憶関数とマクロ変数の特性時間が同程度になることがわかった。そして、それにより、長時間領域においてマクロ変数の時間相関関数には指数減衰型とは異なる時間相関関数が見られることが分かってきたのでご報告させていただく。

[1] H.Mori et al.,Prog.Theor.Phys.**109**(2003),333.,**111**(2004),635.

[2] H.Tominaga et al.,Prog.Theor.Phys.**109**(2003),575.,**120**(2008),635. (e-mail:hirotaka@cc.saga-u.ac.jp)

[3] R.Ishizaki et al.,Prog.Theor.Phys.**109**(2003),169.,**116**(2006),1051.

## G-2 非定常時系列のパターン・エントロピーによる特徴づけ

福岡県立大人社<sup>A</sup>, 鹿大名誉教授<sup>B</sup> 石崎龍二<sup>A</sup>, 井上政義<sup>B</sup>

私たちは、非定常時系列の変動の複雑さをパターン・エントロピーを使って定量化する試みを行ってきた。具体的には、ラットの睡眠覚醒状態のレベルの特徴づけのため、ラットの脳波のパターン・エントロピー時系列法による解析を行った [1]。また、株価、為替レートなどの非定常な時系列に対しても、パターン・エントロピーを使って、期間別の時間変動の複雑さの定量化を試みている [2]。

今回、為替データを例にして、円ドル為替レート、円ユーロ為替レート、ドルユーロ為替レートなどの複数時系列データに関するパターン・エントロピーの統計的性質について報告する。

### 参考文献

- [1] R. Ishizaki, T. Shinba, G. Mugishima, H. Haraguchi, and M. Inoue: Time-series analysis of sleep-wake stage of rat EEG using time-dependent pattern entropy, *Physica A*, Vol.387, No.3, pp.3145-3154 (2008).
- [2] 石崎龍二: 株価・為替レート時系列のパターン・エントロピー時系列による特徴づけ, 統計数理研究所協同研究レポート「経済物理とその周辺 (7)」, 第 259 巻, pp.1-7 (2011).

## G-3 チューリング不安定性を介して出現する新規な定常パターン

福岡大理<sup>A</sup> 坂本文隆<sup>A</sup>, 西山明子<sup>A</sup>, 宮川賢治<sup>A</sup>

一般的な反応拡散系は、例えば酸化還元などの二状態でパターンが構成される。三状態以上の多重安定パターンが現れる反応拡散系の構築ができれば、自己組織化による、より多様なパターン形成の理解が進むと考えられる。今回、チューリング不安定性下の Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応において、酸化還元の間状態を背景とした酸化還元パターン (三状態パターン) が自発的に現れることを見出した。三状態パターンとして、酸化還元スポットペアや酸化還元スポットが連なったネックレス状パターン (図) などが現れた。このとき、この系のチューリング不安定性は BZ 反応場として用いた油中水滴型のマイクロエマルジョン (ME) によって導入される。ME の水滴の体積分率を大きくしチューリン

グ不安定性を消去すると、三状態パターンが単純な伝搬波へと変化した。これは、今回報告する三状態パターンにチューリング不安定性が重要な役割を果たしていること示している。



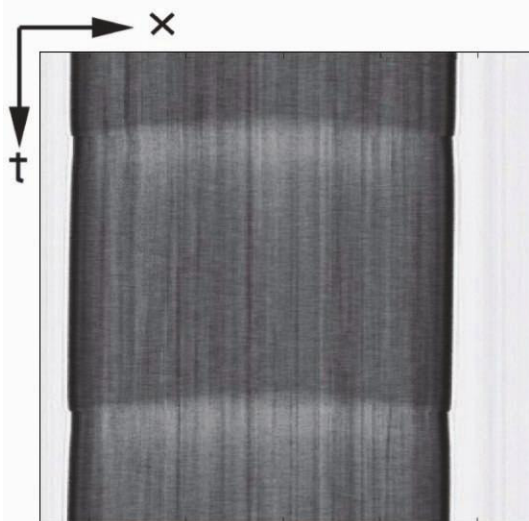
図 酸化還元スポットのネックレス状パターン

## G-4 微小液滴中の自己触媒反応による力学振動

福岡大理<sup>A</sup> 西山明子<sup>A</sup>, 坂本文隆<sup>A</sup>, 宮川賢治<sup>A</sup>

近年、様々な系で見られるアクティブマターについて興味を持たれており、Belousov-Zhabotinsky(BZ) 反応に伴う表面張力の変化によって形状を変化させる液滴もその一つといえる。

本研究では、界面活性剤を含むオイル相に半径数百 $\mu\text{m}$ の BZ 液滴を作製して、実験を行った。右図の時空間プロットは、BZ 反応液滴の色の变化と、液滴とオイル相の境界部分の動きを示している。酸化状態が液滴の中心から外側に向かって伝播し、界面に達したところで、液滴の形状の変化が起きていることがわかる。今回、複数個の BZ 液滴による結合振動子系について特に注目した。BZ 反応溶液の化学振動とそれに伴う力学振動について、実験結果の詳細は当日報告する。



右図：縦軸に時間の経過を示す  
明るい部分は酸化、暗い部分は還元状態を表す

## G-5 適応結合した化学振動子系のクラスタリング

福岡大理<sup>A</sup> 山崎省二<sup>A</sup>, 宮川賢治<sup>A</sup>

複数の要素が動的に結合した系では、様々な集団ダイナミクスが観測される。今回、我々は要素間の結合強度が動的に変化する系でどのようなダイナミクスが現れるかを調べた。Belousov-Zhabotinsky 反応をする複数の振動子を用い、系の反応情報を光学的な方法でフィードバックをかける事で、動的な結合強度を実現した。 $i$  番目の振動子に照射する光強度  $I_i$  は、 $I_i(t) = I_0 + \sum_{j=1}^N K_{ij}(f(B_j(t)) - f(B_i(t)))$  で表される。ここで、 $I_0$ 、 $N$ 、 $K$ 、 $B$ 、 $f(B)$  はそれぞれ、照射光強度、振動子数、結合強度、振動子表面の明るさ、 $B$  の関数である。振動子  $i$ 、 $j$  間の結合強度  $K_{ij}$  は、 $K_{ij} = \alpha(1 - \cos(\beta(\phi_i - \phi_j)))$  で決定される。ここで、 $\phi_{ij}$  は位相、 $\alpha$ 、 $\beta$  はパラメータである。 $\alpha=700$ 、 $N=100$  で実験を行なったところ、図のような結果が得られた。この結果、結合強度が動的に変化する系では、 $\beta$  の値によってクラスタの数が変化することが分かった。

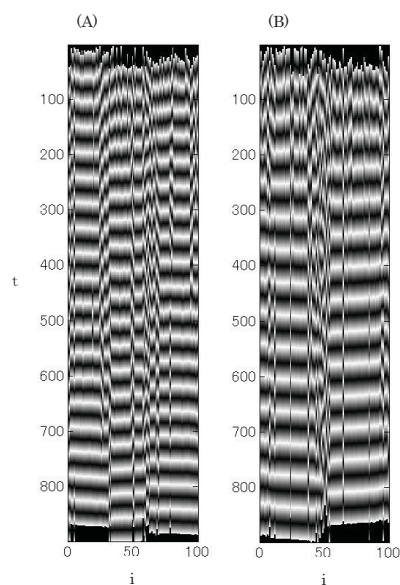


図 振動子の位相の時間進展。(A)は  $\beta=1.0$ 、(B)は  $\beta=2.0$

## G-6 フラクタル構造体による音波散乱

九州大学大学院芸術工学府<sup>A</sup> 奥尾章矩<sup>A</sup>, 河辺哲次<sup>A</sup>

フラクタル構造体とは、全体とその一部が同じ構造、すなわち自己相似性を有するものである。音響分野では、多孔質材質のモデルとしてフラクタルの応用が考えられている。

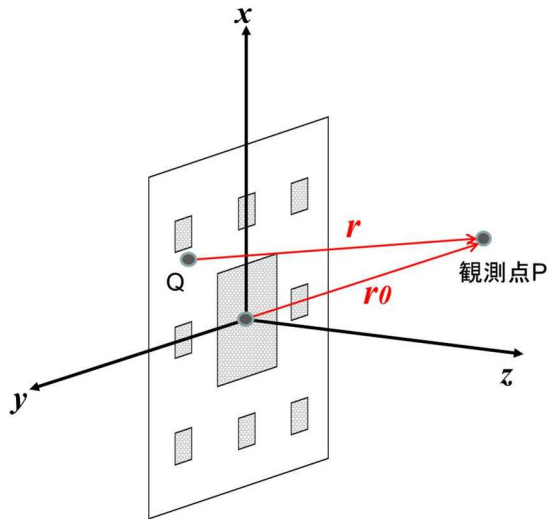
コンサートホールやスタジオなど高い音響効果が要求される場所では壁面で音を等方的に反射、散乱させることが重要となる。堅さや凹凸など音響アドミタンスがフラクタル形状に分布している壁面は音を一様に散乱させ得る。本研究では代表的なフラクタルの一つであるシルピンスキーカーペットによる音波の反射、散乱をKirchhoffの回折理論を用いて解析した。

回折理論によれば、 $xy$ 平面上に置かれた反射板からの回折波振幅  $U(P)$  は (1) 式で表される。

$$U(P) = -\frac{i}{\lambda r_0} \iint_S A e^{ikr} dS \quad (1)$$

$\lambda$ ,  $k$  は入射波の波長および波数、 $r_0$  は原点から観測点までの距離、 $r$  は反射板内の点  $Q$  から観測点までの距離、 $A$  は反射板表面での振幅を表している。この  $A$  と積分領域にシルピンスキー

カーペットの特徴を与えることで、カーペットからの反射波を計算することができる。本講演では、数値シミュレーションによる結果を報告する。



## G-7 雷鳴の音響特性

九州大学大学院芸術工学府<sup>A</sup> 光永誠<sup>A</sup>, 河辺哲次<sup>A</sup>

雷放電は自然界で起こる大規模な火花放電である。雷放電には雷鳴と呼ばれる音波が伴う。静電気による放電など、身近に観測される短い距離の火花放電に伴う音波はパルス的で高い周波数成分まで含んでいる。一方雷鳴は数十秒間にわたって持続する音である。また雷鳴の周波数成分は高い方から時間と共に減衰して、低い周波数成分が残る。

本研究では以上のような雷鳴の音響特性を説明するため、雷放電路を用いて雷鳴のシミュレーションを行った。雷放電路上に音源が分布しており、それらの音源からの音波の重ね合わせが、観測点での雷鳴と考える。この時、観測点  $\mathbf{x}$  における雷鳴の音圧振幅  $\Phi(\mathbf{x}, t)$  は、

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \int d\omega A(\omega) \int_{\Gamma} d^3x' \frac{\exp\{i\omega(t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)\}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (1)$$

と書ける。ここで  $A(\omega)$  は雷放電路上の音源で発生する音波のスペクトル、 $\Gamma$  は雷放電路の形である。これらのパラメータを変えることで、音源における音波や雷放電路の形が、観測点での雷鳴の音圧波形に与える影響を考察する。

## G-8 超離散化された線形波動方程式の構造

九州大学大学院芸術工学府<sup>A</sup> 儀保伸吾<sup>A</sup>, 河辺哲次<sup>A</sup>

「超離散」とは、微分方程式の大域的な性質を失わずに、独立変数(時間・空間)と従属変数(状態)を離散的に扱う方法である。超離散化された方程式には、粒子性と波動性が現れるので、現象の新しい解析モデルとして期待されている。

本研究では、線形波動方程式

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

の超離散化を試みた。(1)式は、音波や電磁波など、多くの物理現象を記述する、最も基本的で重要な方程式の一つである。(1)式を超離散化すると、

$$F_n^{t+1} + F_n^{t-1} = \max[2F_n^t, F_{n+1}^t + F_{n-1}^t - L] \quad (2)$$

を得る。ここで、 $L$ は速度に対応するパラメータである。

解析の結果、次の二つのことが分かった。

(A) この式を変数変換  $u_n^t = F_{n+1}^t - 2F_n^t + F_{n-1}^t$  で書き換えた方程式は、パラメータ  $L = 0$  のとき、(1)式の特徴を再現する。

(B) この書き換えた方程式は、超離散戸田格子方程式

$$u_n^{t+1} - 2u_n^t + u_n^{t-1} = \max[0, u_{n+1}^t - L] - 2\max[0, u_n^t - L] + \max[0, u_{n-1}^t - L] \quad (3)$$

と一定の関係がある。

本講演では、これら(A)と(B)について報告する。

## G-9 Aliev-Panfilov 方程式における不安定固定点の安定化

熊本大教育<sup>A</sup> 上松英介<sup>A</sup>, 大村詠一<sup>A</sup>, 福島和洋<sup>A</sup>

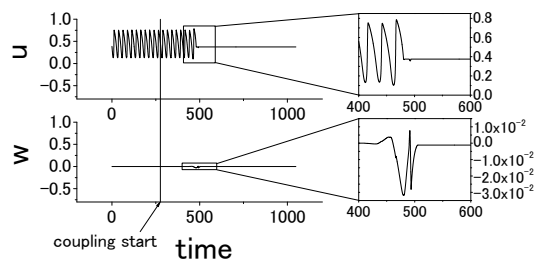
Aliev-Panfilov(AP)方程式はイヌの心臓拍動のモデルである。我々は不整脈の一種である心室頻拍によく似た周期運動を行う状態に対し制御を行った。制御を行う方法としては2004年にPyragasらによって提案された不安定コントローラによる時間遅れフィードバック結合[1]を用いる。コントロールシステムは次の3つの方程式で記述される。

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -cu(u-a)(u-1) - uv + w \operatorname{sgn}(u-u^*) \\ \dot{v} &= \left( \epsilon + \frac{\mu_1 v}{\mu_2 + u} \right) \{ -v - cu(u-b-1) \} \\ \dot{w} &= \lambda w - K(u-u_\tau) \operatorname{sgn}(u-u^*) \end{aligned}$$

この系において、AP方程式から時間遅れ信号を不安定コントローラに送り、さらにAP方程式へフィードバックさせている。ここで、 $u, v$ はそれぞれAP方程式の速い変数と遅い変数であり、 $w$ は不安定コントローラである。また、 $u^*$ は $u$ の不安定固定点であり、 $\tau = 2\pi$ ,  $u_\tau = u(t-\tau)$ である。我々は、 $u^*$ のまわりで周期運動する状態

に対し、上の制御を行うことによって、不安定固定点を安定化させることに成功した。図は数値シミュレーションを行った結果であり上から $u, w$ の時間発展を表している。couplingを開始して少し時間が経つと、AP系はリミットサイクルから固定点へ転移する。そのとき、コントローラは微小な値で推移する。右枠内に転移区間の拡大図を示す。

[1]K. Pyragas et al. : Phys. Rev. E 70 (2004) 056222.

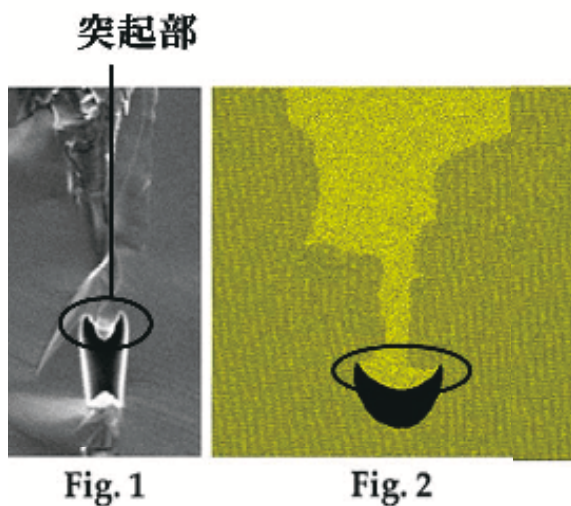


## G-10 ステルスダイシング過程におけるシリコンウェハー内のポイド形成のMDシミュレーション

熊本大学大学院 自然科学研究科<sup>A</sup>, 浜松ホトニクス株式会社<sup>B</sup> 島村孝平<sup>A</sup>, 奥間惇治<sup>B</sup>, 大村訓史<sup>A</sup>, 下條冬樹<sup>A</sup>

半導体を作る工程に「ダイシング」という作業がある。シリコンウェハーを個々のICチップに切り離す作業である。浜松ホトニクス(株)で開発された「ステルスダイシング(SD)」と呼ばれるダイシング法はウェハーに対し透過性の波長をもつレーザーをウェハー内部に集光し、集光点付近のみを改質させウェハーを分断する。この方法は表層部へのダメージが無いなど従来の方法よりも多くの利点があるが、改質領域形成及び亀裂破壊の機構については未解明の部分がある。現在我々はこれの解明の為分子動力学法(MD)を用いた計算機シミュレーションを行っている。今回の講演ではポイドの形成過程について報告する。Fig.1はウェハー断面写真のレーザー集光領域を拡大したもので黒い窪みがポイドである。Fig.2は我々が作成したモデルのスナップショットで、レーザー照射後のポ

イド形成が再現されている。特に図中の丸の部分がFig.1の突起部の形状とよく一致している。



## G-11 2次元平面に吸着した環状高分子の形状の圧力依存性

九州大学<sup>A</sup>, 九州大学<sup>B</sup>, 九州大学<sup>C</sup> 蓬田光樹<sup>A</sup>, 坂上貴洋<sup>B</sup>, 中西秀<sup>C</sup>

環状高分子はトポロジーに由来する幾何学的な拘束条件のために鎖状高分子とは異なった性質を示すことが知られている。例えば、排除体積鎖のボンド相関において線形鎖ではべきで0に収束していくのに対し、環状鎖では負の相関を持つことが知られている。

2次元固体表面に吸着された環状鎖メルトの興味深い点の1つに、環状鎖の内側に同じモノマー数の別の環状鎖が入り込んだ2重リングの構造の存在がある。2つの環状鎖はお互いに押し合っ圧力を及ぼし合う結果、特異な形状を取る。最近、ローザンヌの実験グループは、メルト中のリングや2重リングの構造と加圧下での単一リングの構造の類似性を指摘した。[1]

本研究では、2次元平面に吸着した環状高分子に圧力を加えた時の形状を調べるために、2次元正方格子上的可変ボンド長モデル

を用いてモンテカルロシミュレーションを行った。その結果、 $R_g$ の $N$ 依存性についてはべき乗則を示し、べき指数は $|p|$ の大きなところで理論値 $\frac{5}{8}$ となることを確認した。また、 $R_g$ の $p$ 依存性については変化が小さいので指数を正確に求めることは不可能であるが、結果は理論値 $-\frac{1}{12}$ と矛盾しない。[1]G.Witz, K.Rechendorff, J.Adamick, and G.Dietler Phys. Rev. Lett. 106, 248301 (2011)

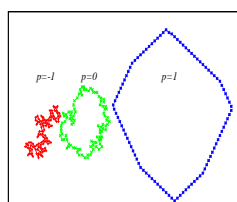


図1: 内圧 $p$ を加えたときのリングの形状

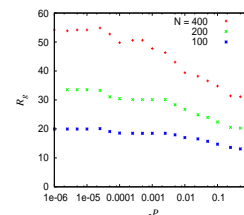


図2: 慣性半径 $R_g$ の圧力依存性

## G-12 AFM probing opioid signalosome on neuroblastoma

九州大学物理<sup>A</sup>, IPBS/CNRS<sup>B</sup> Lara Gay Mocerro Villaruz<sup>A</sup>, Catherine Tardin<sup>B</sup>, 水野大介<sup>A</sup>

AFM probing opioid signalosome on neuroblastoma

Lara Gay M. Villaruz<sup>1</sup>, Catherine Tardin<sup>2</sup>, Daisuke Mizuno<sup>1</sup> <sup>1</sup>Department of Physics, Kyushu University <sup>2</sup>IPBS/CNRS, University of Toulouse, France

Opioid receptors on the nerve cell surface are the major target of pain treatment since they are responsible for sensing and relieving the pain signals. The confinement domains composed of a cluster of opioids and many other membrane proteins and lipids could play the role of signaling platforms (signalosome) that permit the encounter of the various proteins involved in the enzymatic cascades and therefore the fast response of receptor signaling to extracellular activation. It is therefore likely that the proper receptor function would coincide with dynamic physical properties of the signalosome. As a first step towards this motivation, we aim to detect and quantify the specific interaction between the opioid receptor and its antibody. AFM probe carboxyl-functionalized is converted into a biosensor by covalently coupling an amine-containing antibody (T7 mouse monoclonal antibody) through a Polyethylene glycol cross-linker. The tip modified with anti-T7 can detect the T7-tagged complementary receptor on SH-SY5Y neuroblastoma cell line. Forces between the tip and receptor were monitored by continuously indenting and retracting the tip at constant lateral positions. Molecular recognitions are evident from the attractive signals of a unique shape, as a result of antibody-receptor interaction during the retract phase. The attractive force increases until the bond between the antibody and receptor breaks. Distribution of unbinding forces is obtained at different loading rates, different

## G-13 The thermal and athermal fluctuations in active gel

九州大学 物理<sup>A</sup> Heev Ayade<sup>A</sup>, Peijuan Zhang<sup>A</sup>, 豊田聖啓<sup>A</sup>, 水野大介<sup>A</sup>

Thermal and Athermal Fluctuations in an Active Gel

Heev L. Ayade<sup>1</sup>, Peijuan Zhang<sup>1</sup>, Toshihiro Toyota<sup>1</sup>, Irwin M. Zaid<sup>2</sup>, Julia Yeomans<sup>2</sup> and Daisuke Mizuno<sup>1</sup> <sup>1</sup>Department of Physics, Kyushu University, 8158581 Fukuoka, Japan <sup>2</sup>Rudolf Peierls Center for Theoretical Physics, University of Oxford, Oxford OX1 3NP, UK

In an active gel system (actin/myosin gel), motor proteins spontaneously generate forces and drive the system out of equilibrium. In this study, we examine the non-equilibrium statistics and dynamics of the system by analyzing the athermal fluctuation, which is probed by tracking the position of the embedded particles (video microrheology). The lag-time dependence of the distribution of the displacements of probe particles, known as van Hove correlation function, implies the dominance of athermal fluctuations over thermal fluctuations. The distribution of the athermal fluctuation is found to be far from Gauss, which is linked to the activities of relatively small numbers of motor proteins. Furthermore, the instantaneous distribution is found to be understood with Levy statistics including the rapidly decaying tails due to the truncation in the actual fluctuation. Sum action of multiple motor proteins, which drives the probe particle, only slowly converges to Gauss distribution because of the  $1/r^2$  spatial decay of the motor impacts. We discuss the dependence of the statistics of athermal fluctuations on the particle size, substantially equal to changing the concentration of myosin motor proteins.



## G-14 非熱的に駆動された細胞モデルの非平衡レオロジー

九州大学 物理<sup>A</sup> Peijuan Zhang<sup>A</sup>, Heev Ayade<sup>A</sup>, 水野大介<sup>A</sup>

Non-equilibrium mechanics of athermally driven cell models Peijuan Zhang, Heev Ayade, Daisuke Mizuno We investigate the non-equilibrium mechanical properties of cells which are driven out of equilibrium by the molecular motors. Athermal and thermal fluctuations both in the reconstituted cytoskeleton in vitro and in the cytoplasm in vivo were probed using video microrheology by tracking probe particles embedded or phagocytosed in the sample. We analyzed the full distribution of probe particles displacements (lag-time dependent Van Hove correlation function) and found that in vitro and in vivo results showed similar feature ; both exhibited a central Gaussian and the exponential tails. After regulating (increasing) the concentration of cytoplasm in vivo by imposing hypertonic stress on the cell with 30mM sucrose, it was found that the exponential side tail distribution disappeared and the characteristic length for the central Gaussian distribution was decreased. Since the volume change induced by the hypertonic stress was 20

## G-15 外力下における vimentin ネットワークのマイクロレオロジー

九州大学 物理<sup>A</sup>, 崇城大学<sup>B</sup> 張通<sup>A</sup>, Peijuan Zhang<sup>A</sup>, 木下英<sup>A</sup>, 安藤祥司<sup>B</sup>, 水野大介<sup>A</sup>

真核生物の細胞内部には細胞骨格と呼ばれる繊維状のタンパク質重合体（アクチン、微小管、中間径フィラメント）からなるネットワークが張り巡らされている。外部から加えられる力学刺激もしくは内部で自ら生成した力に対して、細胞は生理的に応答するが、そのメカニズムを理解するには、まず応力の存在下における細胞骨格の微視的な力学応答を調べる必要がある。そこで本研究では、大変形に抗して細胞の力学的安定性を保持する機能を持つ中間径フィラメント (type  $\alpha$ :vimentin) を用いて、ずり場印加によるネットワークの粘弾性変化を調べた。Vimentin は主に間葉系細胞中に大量に発現するため、例えば上皮性の癌細胞が間葉系に転換して転移・浸潤能を獲得する際のマーカーとして用いられるが、その力学的性質や生理的役割については不明な部分が多い。本研究では、0.75mg/ml の濃度で重

合させた vimentin ゲルに均一なずり変形を加えつつ、内部に分散させたコロイド粒子の熱運動を顕微鏡観察した (ビデオマイクロレオロジー)。このときコロイド粒子の熱運動は、それぞれの運動方向の力学特性を主に反映することが期待される。事実今回の実験では、加えたり場 (x-方向) に対して vimentin ゲルが異方的に硬化することを示唆する結果が得られた。従来、様々な細胞骨格ゲルは、応力が加えられた方向に非線形に硬化することがマイクロレオメータを用いて確認されてきたが、他の方向の力学特性は不明であった。今回の結果によれば、細胞内部の微視的な力学環境は分子組成や構造の分布のみならず、分子モーターが各所で発生させている応力の向きと分布にも強く依存して変化していることが予想される。



## G-16 粒子法を用いた原形質流動の数値モデルに関する研究

佐世保高専・電気電子<sup>A</sup> 三橋和彦<sup>A</sup>, 中川龍之介<sup>A</sup>

細胞の原形質を Moving Particle Semi-implicit (MPS) Method (Koshizuka) を用いてモデル化し、原形質流動を数値的に模倣することを試みた。細胞内の原形質と呼ばれる液体状の媒質は粘弾性をもつ。例えば光ピンセットを用いた実験によって、原形質が pN オーダーの駆動力に対し 0.1sec オーダーの応力緩和を示し、加硫ゴムの百万分の一程度の弱い剛性率を持つことが報告されている (Mitsubishi)。これは、レイノルズ数が非常に小さいと考えられてきた細胞内であっても、内容物の弾性が力学現象に関与している可能性を示している。本研究では、こうした弾性が流動の形成と安定化にどの様に寄与するかを検証するため、粒子法による二次元数値モデルを研究した。MPS 法に従い Navier-Stokes 方程式を二次元で離散化するため、圧力項に勾配モデルを、粘性項に Laplacian モデルを適用した。弾性に関しては、今回は単純な線型バネモデルに重み関数をかけた粒子間相互作用として記述し、流動の安定性と境界条件に対する影響を調べた。原形質流動の駆動力は正方形、八角形、円形などの境界の接線方向にはたらくように印可し、粒子が壁面に一定距離以内に侵入したときのみ作用させた。数値計算の結果、流動安定性については弾性によって界面の駆動力が遠方まで伝搬し、粒子群が結晶塊のような集合体を形成しつつ流動する様子が見られた。また正方形以外の境界条件では、弾性係数の増加とともに流体内の速度と圧力の不安定性が増加した。本会では一連の数値計算の結果を報告するとともに、細胞内の力学現象における弾性の物理的意味について議論する。

## G-17 大きな粒子の拡散～粒子と溶媒の間の引力の効果～

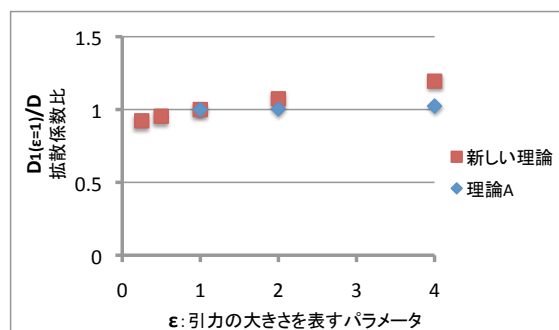
九州大学大学院理学府物理学専攻<sup>A</sup>, 九州大学大学院理学研究院物理学部門<sup>B</sup>, 九州大学大学院理学研究院化学部門<sup>C</sup> 稲吉裕子<sup>A</sup>, 吉森明<sup>B</sup>, 秋山良<sup>C</sup>

●目的：最近タンパク質程度の大きな粒子の拡散に対して新しい理論が開発され、剛体球系や 2 成分系の研究に用いられている。この理論では、溶媒の動径分布関数から簡単な計算で拡散係数を求められる。しかしこの新しい理論は導出の過程で近似を行っており、これらの近似の妥当性を調べることを目的とする。

●手法：溶質-溶媒間に引力が働くときの拡散係数について、新しい理論によって求めた値と、より精度の高い理論 (理論 A) によって求められた値とを比較する。引力には kihara-potential を仮定した。引力の大きさを表すパラメータ  $\epsilon$  を変化させて拡散係数を計算し、理論 A による結果と比較した。

●結果：新しい理論による拡散係数の絶対値は、理論 A による値より 0.5 倍程度ずれた。しかし、

引力による拡散係数の変化はほとんど変わらなかった。 $\epsilon = 1$  のときの拡散係数  $D_1$  と  $\epsilon = 4$  のときの拡散係数  $D$  との比は、理論 A では  $D_1/D = 1.02$ 、新しい理論では  $D_1/D = 1.19$  となり、1 割程度の違いしか見られなかった (図)。



## G-18 大きな粒子の拡散～溶媒 2 成分系の理論～

九大院理<sup>A</sup> 中村有花<sup>A</sup>, 吉森明<sup>A</sup>, 秋山良<sup>A</sup>

たんぱく質程度の大きな溶質粒子の拡散には、溶質周りの溶媒粒子の分布が影響を与える。特に溶媒が 2 成分から成る場合、その混合比によって分布が大きく変わるため、比率を変えることで分布の効果を調べることが出来る。

2 成分系において分布の効果を考慮した拡散係数の理論を、1 成分系 (Ref.G-17) と同様に摂動理論を使って開発した。溶媒の大きさが各成分で異なる場合にも適用できる。

この方法を用い、溶質と 2 成分の溶媒 (以下それぞれ溶媒、共溶媒) とともに剛体球のときの拡散係数の計算を行った (Fig.1)。その結果、共溶媒を少量添加しただけで拡散係数に大きな影響が現れ、Stokes-Einstein 則で計算した値  $D_{SE}$  からのずれは共溶媒を添加していくとさらに大きくなるのが分かった。

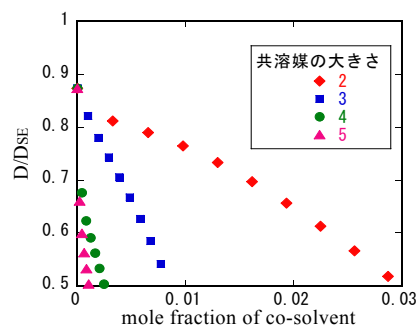


Fig.1 新しい理論により計算した拡散係数(D) 横軸は共溶媒のモル分率、縦軸のDSEは、Stokes-Einstein則から計算した値。粒子の大きさは 溶質:溶媒:共溶媒=50:1:2~5。

## G-19 大きな粒子が狭い空間に入るときの溶媒の効果

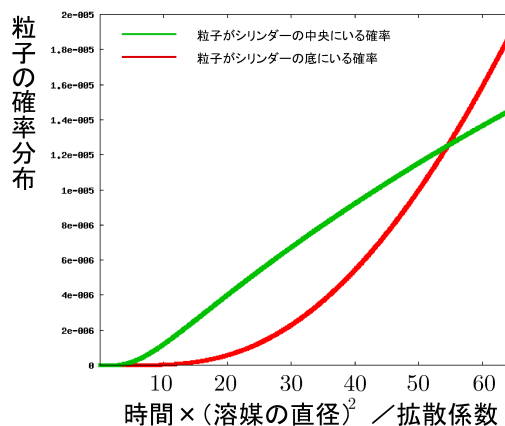
九州大学理学府物理学専攻<sup>A</sup>, 理学研究院物理学部門<sup>B</sup>, 京都大学大学院エネルギー科学研究科<sup>C</sup>, 京都大学エネルギー理工学研究所<sup>D</sup> 原諒平<sup>A</sup>, 吉森明<sup>B</sup>, 天野健一<sup>C</sup>, 木下正弘<sup>D</sup>

粒子が狭い空間の中に入る現象はシャペロニンの作用機構など、生体内で多く知られている。天野、木下は平衡状態の計算でシャペロニンの作用機構に溶媒が重要であることを示唆した。この示唆を確かめるために、ダイナミクスを計算することで狭い空間でどの位置に粒子が入るかを明らかにし、シャペロニンの実験の結果と比較することを目的とした。

天野、木下はシリンダー状の狭い空間での粒子の平均力ポテンシャルを溶媒の効果を取り入れた積分方程式理論を用いて計算した。そのポテンシャルで、フォッカープランク方程式により粒子の分布確率の計算を行った。

その結果、始めは、粒子がシリンダーの中央にいる確率が高いが、時間  $55d_s^2/D$  がだけ経つと、シリンダーの底にいる確率が中央にい

る確率を追い抜くことが分かった (図)。ただし、 $D$  は拡散係数、 $d_s$  は溶媒の直径である。つまり、粒子は始めシリンダーの中央に留まるが、時間が経つとシリンダーの底まで移動する。



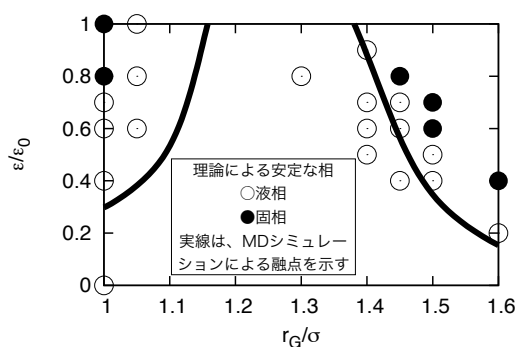
## G-20 Lennard-Jones-Gauss 系の固液相転移

九州大学<sup>A</sup>, 東京電機大学<sup>B</sup> 末松安由美<sup>A</sup>, 吉森明<sup>A</sup>, 才木将史<sup>A</sup>, 松井淳<sup>A</sup>, 小田垣孝<sup>B</sup>

[目的] Lennard-Jones-Gauss (LJG) 系の固-液相転移点を計算し相図を作成する。LJG 系は、二つの極小をもったポテンシャルで相互作用する粒子系である。また、単成分でガラス転移が起きることで注目されており、パラメータにより二つ目の極小の位置 ( $r_G$ ) と深さ ( $\varepsilon$ ) を変えることができる。3次元 LJG 系に理論的手法を適用した結果を分子動力学 (MD) シミュレーションと比較し、理論の有効性を検証するとともに MD シミュレーションのみでは分からない LJG 系の特徴を明らかにする。

[手法] 自由エネルギーの計算に密度汎関数法 (DFT) を用いた摂動論を適用した。引力部分を摂動項として、斥力部分を剛体球で近似し、剛体球の部分は DFT で求めた。この手法は LJG のような複雑なポテンシャルでも問題なく適用できる。得られた液相と固相の自由エネルギーをプロットして共通接線を引き、その接点から共存密度を求める。

[結果] LJG 系の広いパラメータでの相図を作成したところ、MD シミュレーションの結果と定性的に一致した (図)。相図においては、どちらの結果も二つ目の極小の深さ  $\varepsilon$  を大きくすると、fcc 結晶が安定であった。一方、MD に比べて理論の結果では液相の領域が広く出た。また、 $1.15 < r_G/\sigma < 1.4$  では、 $\varepsilon/\varepsilon_0 < 1$  でともに結晶化しなかった。



## G-21 溶媒内イジングモデルの研究

京都大学大学院エネルギー科学研究科<sup>A</sup> 天野健一<sup>A</sup>

本発表では、等間隔、一次元的に配置された溶質の理論的研究をし、その物理的性質を紹介する。ここで、それら溶質は矢印の様な形 (例: 円錐) をした剛体であり、各溶質の方向は上か下に向く事ができる。この溶質らが真空中または連続溶媒中にあった場合、それらの方向性に何ら興味深い事は起きず、ランダムのままである。しかし、その溶質らが粒子浴 (例: 剛体球溶媒) 中にあった場合、興味深い物性が現れる。最近接溶質間の距離が変化する事で、溶質らの方向性が、強磁性「的」⇔ランダム⇔反強磁性「的」に変化する事が分かった。また、その溶質間距離が十分に長くなると、溶質らの方向性は完全にランダムになる事が分かった。本発表では、この特殊と思えるシステムが、どの様に実在するシステムと関連があるのかも示す。