

第1分科会

テーマ: 生体高分子のメゾスコピックな記述を目指して

講師: 中川尚子 (茨城大学理学部数理科学領域)

担当校: 東京大学大学院 総合文化研究科 高塚研究室 (代表) 藤井幹也

タンパク質はアミノ酸残基数 100 から 1000 程度 (分子量 10⁴ ~ 10⁵ かそれ以上) の高分子です。原子のようなミクロスケールよりもはるかに大きく、熱力学量で記述されるマクロスケールよりもはるかに小さい、中途半端な“メゾスケール”に属します。メゾスケールの物理はまだまだ手薄な状況で、ブラウン運動の記述ぐらいしか満足にでき上がっていません。当然ながら、生体高分子のメゾスケール記述はまだまだ遠い先にあります。このような未発達さのために、生体高分子の多くの理論的研究は、多体運動の数値計算によって進められています。分子を多数の原子からなる古典力学系あるいは量子力学系とし、ミクロレベルからボトムアップして調べるわけです。実際は、生体高分子に見られる興味深い現象は相当長い時間スケールに属するので、その現象を探求するために原子のちょっとした動きを再現する必然性はない(どちらかと言えば情報過多)です。このような遠回りのアプローチではなく、一気に興味の対象である生体高分子特有の現象を扱いたいと考え、有効なメゾ記述の構築が必要です。さらに言えば、“一分子レベル”で起こっていることを本質的に理解できた場合は、そのスケールでの直接的記述に消化されるべきなのです。

一方で、どうやってメゾスケール記述を作れば良いのかまだ誰も知りません。生体高分子は特筆すべき“大きい揺らぎ”を示す対象なので、ブラウン運動の理論を参考にしてみるのが一案です。そのためには、まず実際の生体高分子の揺らぎの統計性を明らかにする必要があります。この観点からの研究として「分子動力学計算をもとにした1分子の熱統計力学の構築と揺らぎの吟味」を紹介します。これは生体高分子の詳細から揺らぎを吟味する「下からのアプローチ」です。一方で色々難しい揺らぎの詳細には目をつぶり、標準的ブラウン運動から出発した「上からのアプローチ」として、「揺らぐ世界での熱機関(熱ラチェット・ブラウニアンモーター)」の紹介もする予定です。生体高分子の内部構造を潰した玩具モデルの話題ですが、揺らぐスケールでの熱力学と非平衡の諸問題に光をあてる格好の思考実験の材料を提供してくれます。

以上の話題だけではまだ、ミクロとマクロの両方に折り合いをつけたメゾレベルの現象記述には到達できないですが、少しでも今後の指針を示すことを目指して講義を行なうつもりです。生体高分子の話題には、メゾスケールという難しさだけでなく、非平衡にどう取り組むかという問題が常についてまわること、それ故の難しさと面白さを伝えることができると考えています。もともとは違う文化に育った研究者同士で世代も異なりますが(!), 異なる視点からの活発な議論を期待します。

〈担当校から一言〉

第1分科会では「非平衡と蛋白質」をテーマに中川尚子先生をお迎え致します。一昨年、昨年と第1分科会では「非平衡」がテーマとなっておりますが、今年は「非平衡」にとどまらず、「蛋白質を如何に理解するか」を念頭に講義をお願い致しました。担当校の私自身、原子数個の小さい系を扱っているため、蛋白質のような大きい系は門外漢です。そこで、講義を受動的に聞くだけでなく、質問や議論が活発にできる雰囲気の中で、参加者の皆様と共に学び、悩み、充実した時間をすごしたいと思います。沢山の方のご参加をお待ちしております。