

揺らぐ小さな自己触媒系が引き起こす現象の解明へ

化学反応は世の中の至る所で生じている。たとえば生物の細胞や工業用材料を作るための工場、さらには宇宙空間など、大小さまざまなサイズの場所で反応は生じる。なかでも細胞のような小さな反応系においては「揺らぎ(分子数濃度の平均的振舞いからのずれ)」の影響を無視できない場合があることが、近年の生命科学の進展によって指摘されている。分子数が 100 個増減する「揺らぎ」は、 10^{23} 乗個の分子数から見れば無視できるが、平均 1000 個の分子が含まれる反応系においては 1 割もの変動を意味する。非常に小さな反応系において揺らぎが及ぼす影響に関する理解を深めることは、動的に変化する生命現象の本質を明らかにするための重要な研究課題である。

生命現象を理解する上で重要と考えられている反応の一つに「自己触媒反応」がある。自己触媒反応とは、たとえば $A+B \rightarrow A+A$ という反応式で表されるように、ある分子(今の例では A 分子)が自ら触媒的な役割を果たしながら自己を増やす反応である。最近、大久保潤(東大)、N. Shnerb、D.A. Kessler(共にイスラエル Bar-Ilan 大学)の 3 氏は、小さな自己触媒系における揺らぎが引き起こす現象に関する数理的な解析に成功した。この研究は、日本物理学会発行の英文の学術誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2008 年 4 月号に掲載される。

図 1 に示すような細胞を模した小さな反応系を考える。反応系の内部では自己触媒反応のサイクルが生じ、また反応系の内外で分子の行き来が存在する。あるサイクルを考えた場合、揺らぎを無視する決定論的な考え方では、反応系の内外の分子濃度は一致すると予想される。しかし、実際の反応系が持つ確率的な振る舞い、すなわち揺らぎの影響をきちんと考慮すると、反応系の体積が小さい場合には内外の分子濃度は一致せず、濃度がゼロに近い状態と非常に大きい状態の極端な二つの状態を行き来するようになる。この現象は小さな反応系における興味深い現象の例として、富樫祐一(阪大)と金子邦彦(東大)の両氏が 2001 年に数値実験を用いて指摘したものである。

生命現象を理解する上で、現実の生物に対する実験的研究は欠かせないが、併せて理論的に生命現象に迫ることも大切である。理論的な研究方法としては、生命に特有と思われる現象を数値実験により再現し、その理解を深めるものが一般的であるが、さらに数理的な解析を用いることで、理解しやすい描像を作ることも大切である。本研究では、現象の理解を深めるための数理的な描像を作るため、確率的な過程として解析を行った。自己触媒反応を記述する方程式(マスター方程式)を解析した結果、ランダムウォーク(日本語では「酔歩」と呼ばれる)と呼ばれる簡単な確率モデルを用いて現象の特徴を説明できることを明らかにした。具体的には、反応系の濃度を図 2 に示すような坂道の上で揺動力を受けながら動く粒子の座標と見なせること、粒子の位置によって揺動力の大きさが変化すること、さらに、揺動力が極めて小さい、「準吸収状態」と呼ばれる両端の壁の部分(濃度がゼロに近い状態と非常に大きい状態)が重要な役割を果たしていることなどを解明した。

ヒトゲノム計画によってDNAが解読されたが、すぐにそれが生命現象の理解を意味するわけではない。DNAはあくまでも設計図であり、細胞のような小さな反応系における揺らぎが機能の発現に及ぼす影響などを解明する必要がある。現実の生物に対する実験的研究、数値実験による現象の再現及び詳細な考察、そして理論的研究による数理的な理解の全てが上手くかみ合ってこそ、複雑な生命現象の本質が解き明かされていくものと考えられる。決定論的には進まない「揺らぐ小さな系」での化学反応を、確率的な対象として数理的に扱う本研究のような試みが今後さらに発展することにより、生命現象に関する理解が大いに深まるものと期待される。

論文掲載誌： J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008), No. 4, 044002

電子版： <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/77/044002> (3月25日公開)

< 情報提供： 大久保 潤 (東京大学) >

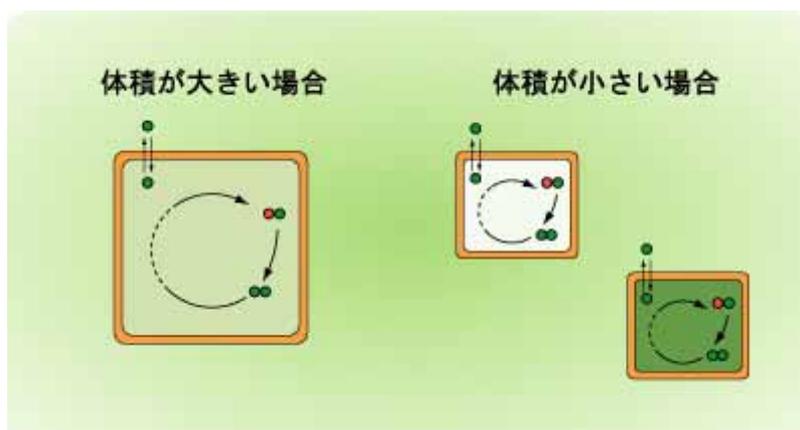


図1 小さな化学反応系。体積が大きい場合には反応系の内外の濃度が一致するが、体積が小さい場合には、内部の濃度が非常に小さい状態と大きい状態という極端な二つの状態を行き来する。

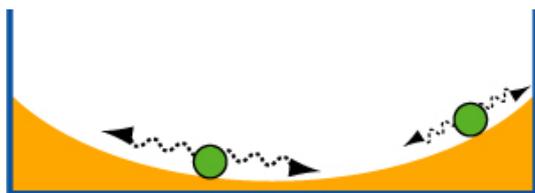


図2 ランダムウォークモデル。粒子の座標が反応系の濃度に対応する。粒子には坂道を下る力がかかる一方で、位置によって大きさが変化する揺動力も作用する。両端の壁の部分は、揺動力がゼロになる準吸収状態になっている。