九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

Effect of a Density Structure of Solvent Particles on Solute Dynamics

原, 諒平

https://doi.org/10.15017/1806806

出版情報：九州大学, 2016, 博士（理学）, 課程博士
バージョン：
権利関係：全文ファイル公表済

（様式６－２）

氏　　名	原　諒平
論　文　名	Effect of a Density Structure of Solvent Particles on Solute Dynamics （溶質のダイナミクスに対する液体の密度分布構造の効果）
論文調査委員	主　査　　九州大学　　教授　　中西　秀 副　査　　新潟大学　　教授　　吉森　明 副　査　　九州大学　　准教授　前多　裕介

論　文　審　査　の　結　果　の　要　旨

原諒平氏は、生体高分子がその機能を果たす際のダイナミクスに関して、その生体高分子を取り囲んでいる溶媒分子が果たす役割を、理論的に研究した。具体的には、シャペロン分子がミスフォールドした高分子を正しく折りたたませる過程に注目し、高分子を円筒型のシャペロン分子内に取り込むダイナミクスに於ける溶媒分子の役割を、密度汎関数法を用いて研究した。

シャペロン分子を円筒、高分子を大きな球、溶媒分子を小さな球でモデル化し、それぞれの分子間の相互作用を剛体球相互作用と仮定したうえで、大きな球が円筒に挿入されてゆく過程における小さな球（溶媒分子）の効果を、以下の２つの方法で調べた。即ち、まず、大きな球と円筒の実効相互作用を周りの小さな球の分布を平衡分布として、大きな球と円筒の間の平均力ポテンシャルを求めた。次に、大きな球が一定の速度で円筒に侵入したと仮定し、その下での小さな球の非平衡分布を時間に依存する密度汎関数法により求め、その分布を用いて系のグランドポテンシャルの増分の時間変化を求めた。平衡状態でのグランドポテンシャルの増分は系がされた仕事で与えられるので、非平衡状態でも近似的に仕事に対応しているとすれば、グランドポテンシャルの増分を速度で割ると大きな粒子に働く力が求められる。

最初の研究では、与えられた大きな球の位置に対して、小さな球の分布を平衡分布と仮定したうえで、大きな球と円筒との間の平均力ポテンシャルを求め、その下での大きな球の分布関数に対する時間発展方程式、即ちフォッカー・プランク方程式を数値的に解いた。その結果、大きな球は円筒の中に吸い込まれてゆくが､円筒の中心軸に沿った軌道をとる確率が最も大きいことが示された。また、最終的には大きな球は円筒の底に到達するが、その前に小さな球の直径程度離れたところにしばらく滞在することが示された。

次に、大きな球が一定速度で中心軸に沿って円筒内部に侵入してゆくとして、周りの小さな球の非平衡分布を求め、それを用いて系のグランドポテンシャルの増分を時間に依存する密度汎関数法で求めた。円筒と大きな球の間に閉じ込められる小さな球の数は、大きな粒子の侵入速度や大きな粒子の直径と円筒の直径の差などのパラメタに大きく依存するが、グランドポテンシャルの増分は閉じ込められた小球の数の関数としてよく表わされることが示された。

これらの成果は、統計物理学およびその生体分子の動力学への応用として意義深く、生物物理学的な視点から多くの示唆を与える。よって、本研究者は博士（理学）の学位を受ける資格があるものと認める。