

## 【学位論文審査の要旨】

### 1 研究の目的

これまでモータータンパク質・代謝酵素・大腸菌に代表されるマイクロマシンに関して、普遍的な性質を抽出するための研究が盛んに行われてきた。本博士論文の目的は、自己推進のメカニズムと状態遷移の普遍的な性質を解明することである。この目的のために、三つ玉スイマーや力双極子などのマイクロマシンを表現するミニマムモデルを用いた解析を行っている。ミニマムモデルから導かれる結果はより多くの具体的な対象に適用できるため、普遍性の高い結果が期待できる。

博士論文の前半においては、マイクロスイマーのミニマムモデルとして三つ玉スイマーモデルを採用し、時間及び空間のスケールを含む流体中での遊泳挙動を議論している。また、マイクロスイマーのモデルとして弾性三つ玉スイマーモデルを提案し、内在的な弾性緩和ダイナミクスによって引き起こされる粘弾性的な振る舞いについて解析している。博士論文の後半では、化学反応によって駆動される周期的な状態遷移を記述するモデルを提案している。さらに、マイクロマシンのミニマムモデルである力双極子によって引き起こされる異常拡散について議論している。

### 2 研究の方法と結果

最初に均一な粘弾性流体中の三つ玉スイマーの推進について議論した。粘弾性流体は緩和時間という時間スケールを持っており、その力学応答は複素粘性率によって特徴づけられる。また、三つ玉スイマーは3つの玉が2つのアームによって直線状に結合されたモデルで、アームを伸び縮みさせることで遊泳できる。三つの玉の運動方程式を解くことで、スイマーの遊泳速度と周囲の流体の複素粘性率の関係式を導出した。この関係式によると、スイマーの時間反転対称が破れたとき粘性項が、構造対称が破れたときに弾性項が現れることがわかった。ここで、粘性項は複素粘性率の実部、弾性項は複素粘性率の虚部を含んでいる。さらに、弾性項の存在により、時間反転対称な変形によって遊泳できることが示され、帆立貝定理が粘弾性流体中では一般化される必要があることが示唆された。また、粘弾性流体のモデルとしてマクスウェルモデルを採用することで、遊泳速度の周波数依存性について調べた。その結果、粘性項は低周波数領域では周波数に比例するが、高周波数領域では周波数に反比例することがわかった。一方、弾性項は低周波数領域で周波数の二乗に比例し、高周波数では一定の値を取ることがわかった。

三章では、擬二次元流体中のディスクスイマーの解析を行った。ディスクスイマーは3つのディスクが2つのアームによって結合されたモデルである。擬二次元流体には、流体力

学的遮蔽帳と呼ばれる長さスケールが存在する。擬二次元流体中のスイマーの遊泳速度を計算し、そのディスクサイズやアーム長依存性について議論した。流体力学的遮蔽帳の存在によって、スイマーのサイズと遮蔽帳との間の競合が起こり、遊泳速度において、大スイマー、中スイマー、小スイマーの3つのサイズ依存性領域が現れることがわかった。これらの結果は単一なサイズ依存性を示す三次元流体との明確な違いを示している。特に大スイマーでは遊泳速度がディスクの半径の二乗に比例することがわかった。

四章では特徴的な時間と長さスケールを持った構造粘弾性流体中の三つ玉スイマーモデルの解析を行った。玉の易動度に媒質の力学的性質を反映させることで、スイマーの遊泳速度と球の易動度を関係付ける一般式を導出した。この表式によって、時間反転対称が破れたときに粘性項が、構造対称が破れたときに弾性項が現れることが示された。構造流体の一例として二流体モデルで記述される高分子ゲルを考えた。二流体モデルは粘性流体と弾性体ネットワークが摩擦でカップルしたモデルで、粘弾性的な時間スケールとメッシュサイズに対応する長さスケールを有している。その結果、構造流体のメッシュサイズとスイマーの長さスケールの競合から、三つ玉スイマーの多様なダイナミクスが生じることがわかった。特に大スイマーでは非単調な周波数依存性が見られ、特徴的な周波数がスイマーサイズによって決定されることがわかった。

五章では、玉が2つのバネによってつながれた、一般化された三つ玉スイマーモデルのダイナミクスについて調べた。それぞれのバネの自然長が周期的に変化することを考えた。その結果、スイマーの遊泳速度が自然長の周波数の関数として得られた。低周波数領域では、遊泳速度は周波数に比例して大きくなることがわかり、これは最初の三つ玉スイマーの振る舞いと一致する。一方、高周波数領域では、周波数を大きくすると遊泳速度が小さくなることが示された。この振る舞いは、弾性スイマーの内部緩和ダイナミクスによって生じる時間スケールにおいて、粘弾性的な性質が生じることを示している。

六章では化学反応によって駆動されるマイクロマシンの状態遷移を説明するためのモデルを提案した。化学反応の進行度を表す反応座標およびマイクロマシンの状態を記述する状態変数を導入した。全自由エネルギーは、化学反応を表現する傾いた周期ポテンシャルと反応座標と状態変数のカップリングエネルギーの和で与えられる。このとき、傾いた周期ポテンシャルは化学反応の駆動力と活性化エネルギーの2つのパラメーターで特徴づけられる。また、マイクロマシンが触媒として機能することから、反応の前後で状態が変化しないことから、周期的な構造を持つカップリングエネルギーを導入した。また、反応座標は「平均第一到達時間」と「平均第一遷移時間」という2つの時間スケールによって特徴づけられる、決定論的なステップ増加関数で表されると仮定した。この仮定を用いることで状態変数の時間発展を計算した。さらに、マイクロマシンの機能性を定量化するために

「状態サイクロン」と呼ばれる物理量を導入し、化学反応パラメーターに対する依存性を議論した。その結果、状態サイクロンは平均第一遷移時間の二乗で表現されることがわかった。さらに、時間スケールを具体的に計算することで、状態サイクロンは活性化エネルギーの二乗に反比例することがわかった。

七章では二流体モデルを用いて、粘弾性流体中のアクティブな力双極子が引き起こす異常拡散について議論した。タンパク質や大腸菌を模した力双極子によって非熱的なゆらぎが生じ、これが粒子の拡散を増大させることを考えた。二流体モデルのグリーン関数を用いて、アクティブな力双極子による一点及び二点相関関数を計算した。このとき、力双極子の時間相関は特徴的な時間スケールを持つ指数減衰で与えられると仮定した。最終的に相関関数のアクティブ要素の時間依存性を解析したところ、異常拡散を表す様々なクロスオーバーを示すことが明らかとなった。これらの結果は、近年の細胞のマイクロレオロジーの実験結果と一致している。

### 3 審査の結果

本博士論文では、粘性流体中ではなく、ソフトマターのような粘弾性体中を遊泳するマイクロマシンの動作機構について理論的に詳細に考察している。具体的には、マイクロレオロジーで使われている基本式を三つ玉スイマーに適用することで、スイマーの遊泳速度とソフトマターの複素粘性率を結びつける関係式を初めて導出した。この関係式によると、スイマーが粘弾性体中を遊泳する場合、必ずしも「ホタテ貝の定理」が成り立たないことが示された。これはマイクロスイマーの遊泳原理において、非常に重要な結果である。また、一般のマイクロマシンにおいても、「状態サイクロン」と呼ばれる新しい物理量を提唱している。この研究成果は、マイクロマシンの非平衡物理化学において、新しい視点を切り開いており、今後、応用も含めて様々な興味深い展開が期待される。安田氏はこれまでに、18編の論文を執筆しており、第一著者の論文は8編出版されていることから、十分な研究成果が得られた判断できる。

### 4 最終試験の結果

化学専攻の規定に従って、中間発表会、事前審査会、公聴会を行って厳正に博士論文を審査した結果、合格と判定する。