

## 4P079

### 分子を想定した粒子の集合体によるパターン形成とダイナミクス

(東大院・総合文化) ○小田切健太、高塚和夫

#### 【序】

自然界では、分子の集合体を含め様々なスケール、環境下におけるパターン形成を観察できる。これらの過程では、複数の要素や要因が複雑に絡み合っている事が現象の理解を困難にしている。多くのパターン形成に関する研究では現象論的に構築された微分方程式によるモデル化が行われており、反応拡散方程式はその代表例である。しかし微分方程式によるモデル化では、局所間での物理量のゆらぎや発展則の時間変化を顕わに表現する事は困難であった。これに対して本研究では、Cellular Automata (CA) 法による現象の理解を目指している。CA 法は空間をセルと呼ばれる単位構造に分割しセル同士の相互作用により複雑なパターン・現象を再現する手法で、非線形現象の研究手段として様々な分野で用いられている。CA 法では局所間の相互作用を規則 (アルゴリズム) として表す事で、微分方程式によるモデルでは難しい局所間での物理量のゆらぎや時系列・環境に応じた規則の変更等を簡単に表現できる。そこで本研究では、これらの事象を考慮した分子 (を想定した粒子) の集合体によるパターン形成過程のモデル化を行い、それから生じるダイナミクスについて調べた。本発表では表面上での原子のクラスター形成過程を想定した化学反応と、細胞分裂や自己触媒反応を想定した自己増殖系での化学反応におけるパターン形成とダイナミクスについて紹介する。

#### 【時空間熱ゆらぎが存在する表面上でのクラスター形成】

時空間熱ゆらぎが存在する表面上における原子スケールでのクラスター形成を調べる為、CA による原子レベルの確率過程モデルを構築した。粒子は表面上の熱によりランダムな揺動を受け、表面上を運動する。表面上の粒子が近接すると化学反応 (化学結合) が生じ、生成した反応熱は表面に伝わる。その一方で、表面上の熱を消費して粒子間結合の解離や粒子の運動が行われる。

これまでに、初期の熱量の違いでクラスター形成過程を分類できる事、熱拡散の速さの違いによりクラスター形成過程や構造に違いが生じる事、クラスター界面での安定な粒子と不安定な粒子の競合がクラスター形成に影響を与える事などが分かっている[1]。

さらに、多彩なクラスター形成過程を調べる為、モデルを多成分系に拡張した。多成分系では、粒子間の結合エネルギーにより成分の区別を行う。本研究では、異種粒子間での結合力の違いによるクラスター形成過程の変化に注目して、異種粒子間結合力を変化させた 2 成分系における数値実験及び解析を行った。各系でのクラスター内部の粒子分布を比較すると、異成分間結合が弱い系では青粒子 (成分 2) の方が緑粒子 (成分 1) に比べて内部に配置している (偏析) のに対し、強い系では両者が均一に配置している (混合) のが観察できる (図 1)。これら偏析・混合状態を定量的に解析する為各成分での構造因子と平均結合数を計算した所、2 つの状態間の相転移的遷移を示唆する結果が得られた。

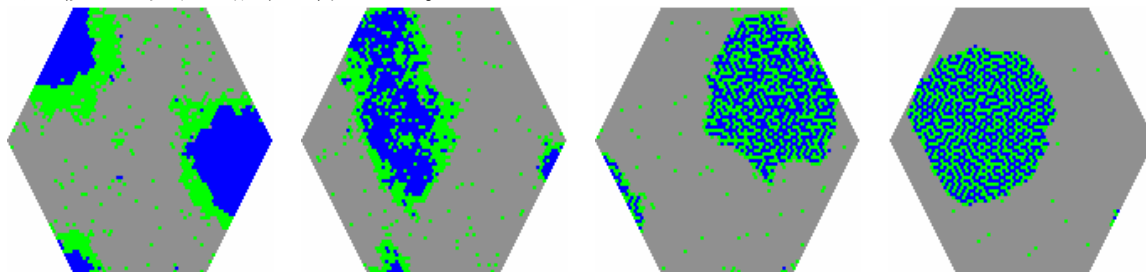
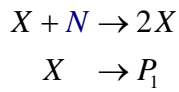


図 1 : 異なる異種粒子間結合力をもち系での粒子分布。右にいくほど結合が強くなっている。

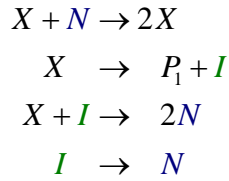
#### 【階層的構造をもつ自己増殖系におけるパターン形成とダイナミクス】

自己増殖過程は、細胞分裂や自己触媒的な化学反応など非常にありふれた自然現象である。ここでは、自己増殖系での化学反応におけるパターン形成とダイナミクスを理解する為、細胞 ( $X$ ) と栄養 ( $N$ ) を想定した因子を含んだ 3 種類の基本となるモデルを構築した。各モデルは次の様に表される。

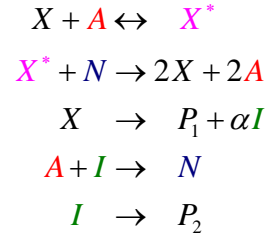
1) 単純自己触媒反応と死滅  
 $X, N$



2) 抑制因子の導入  
 $X, N, I$



3) 活性化プロセスと前駆体  
 $X, N, I, A, X^*$



$X$ : 自己増殖因子(細胞)  $N$ : 栄養因子  $I$ : 抑制因子  $A$ : 活性化因子  $X^*$ : 前駆体

1) 単純自己触媒反応と死滅 ( $X, N$ )

$X$  が  $N$  を消費して自己触媒的に増殖し、 $N$  が尽きると  $X$  は死滅する。この単純なモデルを用いて数値実験を行い、バクテリアのコロニー形成で見られる多様な形状[2]に類似した結果が得られた(図2)。

2) 抑制因子の導入 ( $X, N, I$ )

1) のモデルに  $X$  の自己増殖を阻害する  $I$  (抑制因子) を追加する。このモデルを用いて数値実験を行い、典型的なチューリングパターン(図3)や、Gray-Scott モデルで現れる自己複製パターン[3](図4)が得られた。

3) 活性化プロセスと前駆体 ( $X, N, I, A, X^*$ )

$X$  は活性化プロセスを経て自己増殖すると考えて、 $X$  を活性化させる  $A$  (活性化因子) と活性化された結果として現れる  $X^*$  (前駆体) を加える。このモデルを用いて数値実験を行い、Belousov-Zhabotinsky 反応で見られる様な時空間で変化するパターン(時空間パターン)が得られた(図5)。

これらのモデルは、階層的により複雑な現象(単純な凝集ダイナミクスから時空間パターンダイナミクスへ)を生み出す様に設計されている。本発表では、幾つかの特徴的なダイナミクスについて紹介する。

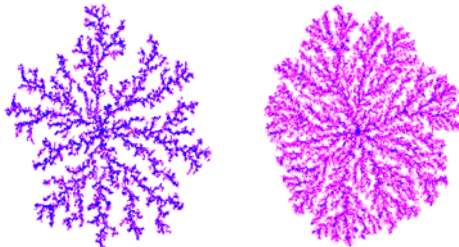


図2: バクテリアコロニー

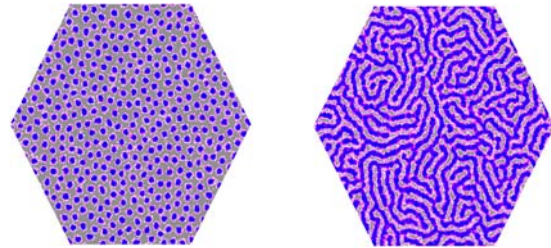


図3: チューリングパターン

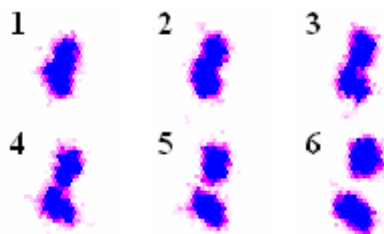


図4: 自己複製パターン

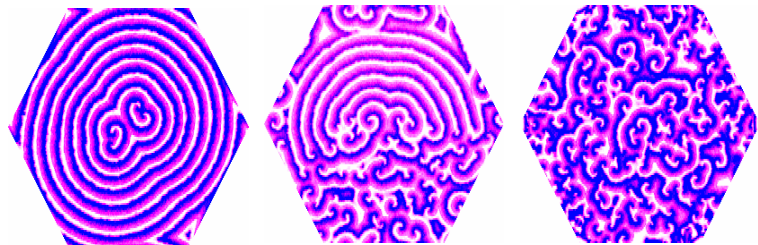


図5: 時空間パターン

参考文献

- [1] S. Yaguma, K. Odagiri, and K. Takatsuka, Physica D **197**, 34 (2004).
- [2] M. Ohgiwari et al., J. Phys. Soc. Japan, **61**, 816 (1992).
- [3] J. E. Pearson, Science, **261**, 189 (1993).