

論文審査の結果の要旨

氏名 我妻 竜三

修士（理学）である我妻竜三提出の本論文はゲル中の DNA の電気泳動のメカニズムを考察したもので、英文で4章から成る。

DNA ゲル電気泳動法は DNA を長さによって分別することのできる、クロマトグラフ技術の一つである。しかしながら、この分別は基本的に経験に基づくものであり、理論的なメカニズムについては、定常電場法と非定常電場法とを問わず確立していない。この研究は、定常電場ゲル電気泳動法による DNA 一分子の運動のメカニズムを統計物理学的な見地から明らかにする目的で、モンテカルロシミュレーションと分子動力学計算を併用して行なわれたものである。

ゲル中、電場下での DNA の運動については、ゲル繊維での制約を仮想的な管の中での運動に置き換えたレプテーション理論が提唱されており、ある程度の理解が得られている。ところが分子動力学計算と蛍光顕微鏡による実時間観察の両方で、電気泳動中に DNA が実際には準周期的な伸縮運動を繰り返すことが見い出され、そのメカニズムは十分には理解されていない。このメカニズムを詳細に明らかにする目的で、本研究では、第二章で独自に工夫したモンテカルロシミュレーション、第三章で分子動力学計算を行なった結果を考察している。まず第二章では格子模型に基づいてボンド揺らぎ模型を用いたモンテカルロ計算の手法を工夫し、実行した結果が解析されている。この手法では現実に起きている現象を格子上で考えるという大胆な単純化がおこなわれるものの、排除体積効果を効率良く取り込める特長をもっている。一方従来から知られているこの手法では、鎖がゲルにひっかかって極端に引き延ばされた時に、その配位を抜け出すことができなくなる困難があった。本研究では実際には鎖に生ずる張力によって DNA は運動を続けられるはずであることに着目して、張力による運動を模擬する目的でたるんだセグメントの準局所的な移動を可能にする運動のアルゴリズムを組み込むという工夫を行なった。この結果、計算が効率的になっただけでなく、2次元系での予備的な考察の後、排除体積効果を取り込んだ3次元空間のシミュレーションにおいて、準周期的な減

衰振動が再現されることを見出した。

また同じアルゴリズムでのモンテカルロ計算によって、本研究では電場がない時の DNA の拡散運動について今まで知られていなかった特徴を見出した。すなわち拡散の過程でのセグメントの重心の平均二乗変位の時間依存性が4つの時間領域に分かれ、最初の時間領域で時間の0.6乗、それより長い第2の領域で3/8乗、第3の領域で3/4乗、最も長時間の領域で1乗となる。特に第2、第3の領域は、本研究ではじめて数値的に明らかにされたものであるが、またその臨界指数はレプテーション理論を仮定するとよく説明できることも見出した。

モンテカルロ計算で再現された減衰振動の結果は伸縮運動がエントロピーに起因する弾性力から生じているのではないかという新しい推測を生むこととなったが、モンテカルロ計算の中には上に述べたように実際には存在しない人為的な運動のプロセスが組み込まれており、準周期運動のマイクロなメカニズムを明らかにすることはできない。そこで第三章では分子動力学計算を行なってよりマイクロに減衰振動のメカニズムを追究している。排除体積効果を取り込んだランジュバン方程式を数値的に解くブラウン動力学法と呼ばれる方法を改良工夫しているが、この方法はモンテカルロ計算に比べれば効率は悪く長時間の振る舞いを見るには困難がある。一方 DNA の鎖をある程度粗視化したビーズの鎖で置き換えるという単純化が行なわれてはいるが、連続空間での運動を忠実に追いかけていることと、あからさまには張力の存在を何も仮定していないため、準周期運動が生じるマイクロなメカニズムを調べられるモデルになっていると考えられる。本研究ではこのブラウン動力学を実行した結果、はっきりとした減衰振動が数値計算結果に再現された。またこの結果をあからさまにフック則に従うバネをつなげた鎖のシミュレーションと比較して大変良く似た振る舞いを行なうことを見出し、準周期運動の原因がエントロピーを原因として生じた張力であるという推定に根拠を与えている。

本研究にはいくつか課題が残されている。第一にモデルの単純化の正当性であり、特に溶液中の DNA の形態形成には静電長距離相互作用や水素結合に伴う引力などが重要な役割を担っていることが知られているが、本研究ではそれらのマイクロな詳細が無視されている。また減衰振動の原因がエントロピーであるという主張はバネのあるモデルとの比較に基づく間接的なものである。より直接的には温度依存性などを詳細に検討した上で結論すべきものである。これらの将来に残されている課題についても本論文では議論

と指摘がなされていると判断される。

以上の問題点や成果について種々議論した結果、本論文審査委員会委員全員によって、本研究は博士（理学）の学位論文として合格として判定された。

なお本研究は、指導教官高山一教授との共同研究の部分があるが、主要部分について論文提出者が主たる寄与をなしたものであることが認められた。