

論文審査の結果の要旨

氏名 中 川 恒

本論文は5章からなる。第1章は序論である。生体二重膜の形態変化に関する従来の研究について概説したのち、本論文で取り組んだ研究の目的とその意義について述べられている。第2章では、本論文で用いた粗視化シミュレーション手法である、散逸粒子動力学法について詳しく述べられている。第3章では本論文の主要な研究課題である、両親媒性分子の加水分解反応と脱水縮合反応によって引き起こされる、二重膜の形態変化の研究について述べられている。第4章では本論文のもう一つの主要な研究課題である、粗視化シミュレーションの結果から二重膜内部の圧力分布を計算する際に必要となる、三体力を二体力の和に分解する手法の研究について述べられている。最後の第5章では、本論文の結論と研究の将来展望について述べられている。

両親媒性分子が形成する二重膜は細胞の主要な構成要素の一つである。また、二重膜は非常に小さな曲げ弾性率をもつため、大きく変形して多様な形状を示す。そのため、生物学だけでなく、ソフトマター物理学の分野においても盛んに研究が行われている。生体膜の形態変化には生体内で起こる化学反応による膜の組成変化が影響していることが知られている。しかし、化学反応生成物がどのような機構で生体膜の形態変化を引き起こすのか、これまでの研究では十分に明らかにされていなかった。本論文では、二重膜を構成する両親媒性分子の加水分解反応と脱水縮合反応によって引き起こされる二重膜の形態変化を、化学反応を確率過程として取り込んだ粗視化シミュレーション手法を用いて詳細に研究している。研究の結果、二重膜の内膜と外膜に不均等に分布する反応生成物が引き起こす、様々な形態変化の詳しい機構がはじめて明らかにされた。今後、他の化学反応にともなう生体膜の形態変化の研究にも役立つ、重要な研究成果である。

また、本論文では、生体膜の形態変化に関係する膜の力学的特性を考える上で重要な二重膜の側面方向の圧力分布を、粗視化シミュレーションの結果を用いて計算する手法についても研究を行っている。粗視化シミュレーションでは、多くの場合、二体力ポテンシャルだけではなく三体力のポテンシャルが使用さ

れる。圧力分布を計算するためには、三体力を二体力の和に分解することが必要である。一般には、多体力を中心力の和として分解する **Central Force Decomposition (CFD)** 法が用いられる。CFD による分解は、三体力や四体力については一意であることが示されていることから、運動量と角運動量の双方の保存則を満たす局所応力テンソルは一意に定まると考えられてきた。しかし、本論文では、運動量と角運動量の双方の保存則を満たす、CFD とは異なる多体力の分解方法が無数に存在すること、分解方法が変更されるとそれに応じて圧力分布も変化することが示されている。この結果は、多体力を含んでいる場合の応力テンソルの計算には依然として任意性の問題が存在することを示すものである。粗視化シミュレーションを用いた研究に広く影響する、意義のある研究成果といえる。

なお、本論文は、野口博司氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となってモデルの構築、計算機シミュレーション実験、結果の解析、及び考察を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、物理学、特に生物物理学について博士（理学）の学位を授与できると認める。