

令和元年6月20日現在

機関番号：12401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K13751

研究課題名（和文）ポリマーのトポロジーと統計物理学的エントロピーの研究

研究課題名（英文）Topology and entropy of polymers

研究代表者

下川 航也（SHIMOKAWA, Koya）

埼玉大学・理工学研究科・教授

研究者番号：60312633

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：「格子結び目の統計力学的エントロピーに対応する指数関数的増大度が、結び目型に依らない」という予想を、 2×1 -チューブ内の結び目について肯定的に解決した。ここでは、2橋結び目の結び目解消操作の研究を行って示している。この成果は、上記の予想についての初めての本質的な貢献となり、研究集会などで公表した際には、高い評価を受けている。この結果に関する論文は現在執筆中である。また、さらに一般のチューブ内の結び目についての考察のため、チューブ内の結び目が局所的であるという概念を導入した。結び目が局所化する場合と局所化しない場合を考え、それをチューブ内のモデルとして構成した際に、その長さに関する考察を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

紐状のポリマーに結び目の構造が含まれると、その物性が変化することが分かっている。この研究では、どのような結び目の構造が現れやすいか、という問題に取り組んでいる。今回の研究では、細い筒状領域にある長いポリマーについては、どの結び目の形も指数関数的には同程度の確率で現れることを示している。また、細い筒状領域内のポリマーの結び目の構造が、局在化して現れるか、それとも大きな構造として現れるかについての考察を行った。これらの結果は、DNAの形状の研究、ポリマー材料の物性の研究への応用が期待される。

研究成果の概要（英文）：It has been conjectured that the exponential growth rate of the number of lattice polygons with knot-type K is the same as that for unknotted polygons. We proved this conjecture for a subset of simple cubic lattice polygons confined to the smallest tube which admits knotting, the 2×1 -tube. As part of the proof, we characterize unknotting operations on diagrams of 4-plat knots.

We also define one way to characterize different configurations of a given knot as either “local” or “non-local” and, for several tube regions we provide both theoretical and numerical evidence that, at equilibrium, the non-local configurations are more likely than the local ones.

研究分野：トポロジーとその応用

キーワード：結び目 ポリマー エントロピー

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(単純)立方格子とは、3次元空間内で、格子点からなる頂点と、長さが1の辺から作られる格子である。立方格子に埋め込まれた結び目や絡み目を、ここでは格子結び目、格子絡み目と呼ぶ。格子結び目や格子絡み目は自己排除体積鎖 (self-avoiding polygon) の例であり、その扱いやすさから、希薄溶液内のDNAやタンパク質などの環状高分子(ポリマー)のモデルとしてコンピュータシミュレーションや理論的研究によく用いられている。

格子結び目の統計力学的エントロピーに相当する指数関数的増大度 (exponential growth rate) は、ポリマーの物性研究の側面では大変重要なものである。環状ポリマーの慣性半径などの物理量がポリマーのトポロジーである結び目型に依存することが知られているが、指数関数的増大度が結び目型に依存するかどうかについては、これまで数値実験の研究は存在するが、理論的研究はほとんどない状態であった。この研究ではこの問題を考察し、数学的な議論の展開を行う。

2. 研究の目的

この研究では、格子結び目のトポロジーに関する研究を行う。特に、「格子結び目の統計力学的エントロピーに対応する指数関数的増大度は、結び目型に依らずに一定となる」という予想の肯定的解決を目指す。まずこの問題を、格子結び目がチューブ状領域に含まれる場合(図1参照)を中心に考察する。これはナノチャンネルなどにおけるDNAなどのポリマーの形状のモデル化などに対応するもので、ポリマーのシミュレーションにおいて良く用いられるモデルである。さらに、格子結び目の指数関数的増大度について、その概念をさらに精密化し、格子結び目の個数の増大の様子について詳細に研究する。

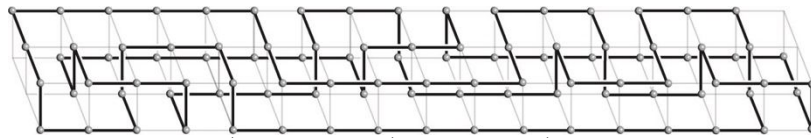


図1: (2 x 1)-チューブ内の格子結び目。2橋結び目はこの領域で実現できる。格子結び目は2橋結び目の4-プラット表示と自然に対応する。

3. 研究の方法

上記の予想をチューブ状領域内の格子結び目について考察する。3次元ユークリッド空間の原点を始終点とする立方格子内の長さが n である結び目の個数を p_n とする。特に、結び目型が K であるものの個数を $p_n(K)$ と表す。 $(K) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log p_n(K)$ を K の指数関数的増大度と呼ぶ。これは統計力学的エントロピーに相当する量である。この (K) が結び目型 K に依存するかどうかという問題を考察する。この問題については、「 (K) は結び目型に依存しない」と予想されている。この予想について、シミュレーションによる結果はあるが、理論的な結果はこれまで得られていなかった。

この研究の準備として行った研究で、(2 x 1)-チューブ(3次元空間内の $2 \times 1 \times$ の領域)内の結び目解消数が1である結び目について、予想が正しいことを観察していた。(図1参照。)つまり、結び目解消数が1である結び目の指数関数的増大度は、自明な結び目の指数関数的増大度と一致するということを示している。ここで、結び目解消数が1の結び目とは、結び目の交差交換1回で自明な結び目に変形出来るものである。

この成果をチューブ状領域内の一般の結び目に拡張する。(2 x 1)-チューブ内の格子結び目は、2橋結び目やその連結和となり、2橋結び目の場合にはその格子結び目は4-プラット表示が自然に対応することを、論文の研究で示した。今回の研究では、2橋結び目の結び目解消操作に着目し、その特徴付けを行うことにより、(2 x 1)-チューブ内の格子結び目について予想の肯定的解決を目指す。

この問題に対して、非自明な格子結び目を局所的な変形で自明な格子結び目と関連づけることが出来ると、肯定的結果を得ることが出来る。そのため、ここでは結び目の交差交換を主に考え、与えられた任意の格子結び目を、自明な格子結び目に有限回の局所変形を用いて変形することを考察する。一般には、与えられた格子結び目は複雑であり、それを自明な結び目の格子結び目に変形することは容易ではない。今回、考察する領域を(2 x 1)-チューブ状領域に制限することにより、そのような局所変形が、図2に示すような格子結び目に関するパターンの挿入と呼ばれる比較的簡単な操作で実現できることを示す。

4. 研究成果

2橋結び目の結び目解消操作の研究を行い、目的に挙げた予想を(2 x 1)-チューブ内の全ての結び目について肯定的に示すことが出来た。この成果は、上記の予想についての理論的側面においての初めての本質的な貢献となり、研究集会などでその結果を公表した際には、多くの反響と高い評価を受けている。

この結果を示すために、(2 x 1)-チューブ内の任意の格子結び目が、その結び目型の交点数以下の回数の操作により、自明な結び目の格子結び目に変形できることを示した。ここで用いた

方法は、結び目の交差交換である。結び目の交差交換は、任意の結び目を自明な結び目に変形することができる。例えば、結び目の最小交点ダイアグラムにおいて、その交点数の半分の交差交換を行うと、自明な結び目へと変形できる。しかし、結び目の一般のダイアグラムを考えると、そのダイアグラムを自明な結び目のものに変形する際の交差交換の回数は限定できない。ここでは、2橋結び目の4-プラット表示のダイアグラムについて、結び目解消操作を考察した。これは、2橋結び目の最小交点ダイアグラムで行う結び目解消操作が、その4-プラット表示でどのように現れるか、という問題の解決により与えることが出来た。示した結果は、2橋結び目の最小交点ダイアグラムにおける交差交換は、4-プラット表示では、隣り合う2本の紐のひねり（フルツイスト）が対応するというものである。この結果から、どの2橋結び目も最小交点ダイアグラムでは交点数の半分の交差交換で自明な結び目に変形出来るので、それらの交差交換を4-プラット表示のひねりに対応させることにより、交点数の半分の箇所で行うひねりでどんなに複雑な4-プラット表示も自明な結び目のダイアグラムに変形出来ることが従う。

この定理を格子結び目の研究に応用する。格子結び目は4-プラット表示に対応したが、そのひねりは図2のようなパターンをもとの格子結び目に挿入することにより実現できる。さらに、このパターンの部分の長さは、結び目によらず一定に決まる。これにより、与えられた結び目の格子結び目は、どんなに複雑であっても、その交点数より少ない回数の局所的な操作で自明な結び目の格子結び目に変形出来ることが従う。この結果と、これまでに知られている議論を組み合わせることで、任意の結び目の指数関数的増大度と、自明な結び目の指数関数的増大度が一致することを証明することが出来た。

この議論は、 (2×1) -チューブ内の絡み目にも拡張できる。ここでは、交差交換の他にバンド手術も考慮する必要がある。絡み目の場合も、 (2×1) -チューブ内の非分離絡み目は、やはり自明な結び目と同じ指数関数的増大度を持つことが従う。

また、さらに深い考察を行い、与えられた結び目を持つような格子結び目の個数についてのより詳細な成果も得ている。これらの結果に関する論文は現在執筆中であり、今後出版の予定である。

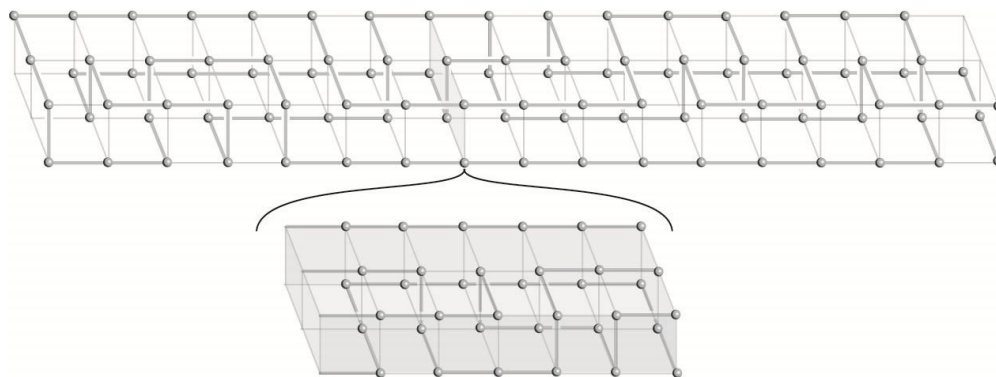


図 2: 4-プラット表示の2本のひものひねりは、格子結び目について局所的なパターンの挿入で実現できる。 (2×1) -チューブ領域内の格子結び目は、交点数以下の箇所でのこのようなパターンを挿入することにより自明な結び目の格子結び目へと変形出来る。

また、さらに一般のチューブ内の結び目についての考察のため、チューブ内の結び目が局所的であるという概念を導入した。最近の研究で、DNA がナノチャンネルを通過する際の様子を観測する実験が行われている。その際に、結び目が局所化する現象などが観測されている。ここでは、結び目が局所化する場合と局所化しない場合を考え、それぞれをチューブ内のモデルとして構成した際に、その長さの分布に関する考察を行った。更に平衡状態では、非局所的なモデルの方が現れやすいことを議論している。この成果は、論文として雑誌 *Soft Matter* に発表している。

5. 主な発表論文等 〔雑誌論文〕(計 7 件)

Neighborhood equivalence for multibranched surfaces in 3-manifolds, Kai Ishihara, Yuya Koda, Makoto Ozawa, and Koya Shimokawa, *Topology Appl* **257** (2019) 11-21. (査読有)

<https://doi.org/10.1016/j.topol.2019.02.005>

Characterising knotting properties of polymers in nanochannels, N. R. Beaton, J. W. Eng, K. Ishihara, K. Shimokawa, C. E. Soteros, *Soft Matter* **14** (2018) 5775-5785. (査読有)

DOI: 10.1039/c8sm00734a

Pathways of DNA unlinking: a story of stepwise simplification, Robert Stolz, Masaaki Yoshida, Reuben Brasher, Michelle Flanner, Kai Ishihara, David J. Sherratt, Koya Shimokawa, and Mariel Vazquez, *Scientific Reports* **7**, Article number: 12420 (2017). (査読有)

<https://doi.org/10.1038/s41598-017-12172-2>

Bounds for the minimum step number of knots confined to tubes in the simple cubic lattice, Kai Ishihara, Maxime Pouokam, Atsumi Suzuki, Robert Scharein, Mariel Vazquez, Javier Arsuaga, and Koya Shimokawa, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** (2017) 215601. (査読有)

<https://doi.org/10.1088/1751-8121/aa6a4f>

〔学会発表〕(計 22 件)

下川航也、トポロジーと高分子科学, 日本数学会 2019 年度年会企画特別講演, 2019 年 3 月 19 日 東京工業大学.

下川航也、結び目理論の高分子科学への応用 -- DNA 組換え酵素、高分子化学、材料科学、統計力学的エントロピー--, 名古屋大学多元数理科学研究科談話会, 2018 年 11 月 21 日.

Koya Shimokawa, Knots, links and spatial graphs in the simple cubic lattice, 2018 Fall AMS Sectional Meeting, San Francisco State University, October 27-28, 2018

下川航也、Knots, links and spatial graphs in the simple cubic lattice, 研究集会「トポロジーとコンピュータ 2018」, 奈良女子大学, 2018 年 10 月 12 日.

Koya Shimokawa, Lattice knots and links in tube regions, 33rd Summer Conference on Topology and its Applications Hosted by Western Kentucky University Bowling Green, KY, USA. July 17-20, 2018

Koya Shimokawa, Lattice knots and links confined in tube regions, Conference on Means, Methods and Results in the Statistical Mechanics of Polymeric Systems II, Fields Institute, University of Toronto, Canada, June 13, 2017.

下川航也、Exponential growth rate of knots and links in a tube region, Workshop on knot theory and its application, 2017 年 3 月 15 日, 埼玉大学.

下川航也、トポロジーの応用 -DNA 組換え酵素、流体力学、高分子化学、統計力学的エントロピー--, 2017 年 1 月 21 日, 名古屋大学.

下川航也、結び目理論の応用について -DNA 組換え酵素、高分子化学、統計力学的エントロピー--, 第 63 回トポロジーシンポジウム, 2016 年 7 月 7 日, 神戸大学.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

なし

取得状況 (計 0 件)

なし

〔その他〕

ホームページ等

下川航也ホームページ

<http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/KoyaShimokawa.html>

6 . 研究組織

(1)研究分担者

なし

(2)研究協力者

研究協力者氏名 : 石原 海

所属 : 山口大学

ローマ字氏名 : ISHIHARA, Kai

研究協力者氏名 : Chris Soteris

所属 : University of Saskatchewan (カナダ)

ローマ字氏名 : Chris SOTEROS

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。