

令和 4 年 5 月 25 日現在

機関番号：16401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2021

課題番号：17K05366

研究課題名(和文)フレキシブルな分子の動線を“見る”ための配置空間モデルのトポロジー

研究課題名(英文)Topology of configuration space model for viewing flow lines of flexible molecules

研究代表者

小松 和志 (Komatsu, Kazushi)

高知大学・教育研究部自然科学系理工学部門・教授

研究者番号：00253336

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)： n が小さい場合、 n 員環炭化水素分子の鎖モデルを与え、モデルの配位空間のトポロジーを研究した。この研究課題では、 n が大きい場合に拡張して、次の結果を得ている。結合角が2つの連続するものを除いて固定角度に等しい3次元ユークリッド空間における等辺多角形の配置空間において、固定角度が正多角形の内角に十分に近い場合、配置空間は対応する次元の球と同相であることを得た。大きな大環状分子を小さな分子で近似する可能性を探るために、次の結果を得ている。正五角形に正五角形を辺で貼り合わせて得られる正五角形のリングに対して、それが平面上にある場合、1つの正五角形に折りたたむことができることを得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

立体構造の変位を許す分子においては、その立体構造の違いによってもつ化学的な性質が異なる場合があることが知られている。このような変形可能な幾何学的構造をもつ数理モデルを考え、その取り得る形状全体からなる配置空間を考えることで、変形の様子を明らかにすることができる。小さな幾何学的構造で得られた結果を大きな幾何学的構造に拡張することは、分子の場合はタンパク質などの大きな分子への応用が得られることを意味する。

研究成果の概要(英文)：When n is small, a chain model of n -membered ring hydrocarbon molecules was given and the topology of the model's configuration space was studied. In this research project, we extend to the case where n is large, and obtain the following results. We consider the configuration space of equilateral polygons in 3-dim Euclid space whose bond angles are equal a fixed angle except for two successive ones. We obtain that when the fixed angle is sufficiently close to the inner angle of the regular polygon, the configuration space is homeomorphic to the sphere with the corresponding dimension.

To explore the possibility of approximating large macrocyclic molecules with small molecules, we have obtained the following results. we consider a kind of polyhedral surfaces obtained by attaching regular pentagons called a regular pentagon ring. We obtain that if a regular pentagon ring is on a plane, it can be folded in one regular pentagon.

研究分野：幾何学的数理モデル

キーワード：数理モデル 配置空間 トポロジー

1. 研究開始当初の背景

5員環, 6員環の環状分子の場合には CambridgeStructuralDatabase にある立体配置のデータに統計的な処理を行って得られる像はそれぞれ, 円周, 2次元球面になるように見て取れます。7員環の場合は特定されていません。私たちはこれらの結果を説明する数理モデルとしてチェーンの環状モデルの配置空間を定義し, そのトポロジーを調べ, 5員環, 6員環の場合には, 配置空間はそれぞれ, 円周, 2次元球面, さらに7員環の場合には3次元球面であることを示しました。タンパク質のように大きな分子が取り得る全ての立体配置のデータを解析することは, その二面角データから成るデータ空間の次元が高次にわたるため, 統計的な手法を用いても難しい。そのため, 大きな分子の数理モデルの配置空間を調べるやり方を模索する必要性が生じていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は, この立体配置の全体像を高次元のまま, トポロジーを用いて調べることで, 立体配置の変形過程をその上の動線として「視覚化」, 「イメージ化」することにあります。分子の数理モデルとして剛性をもつ3次元空間のチェーンを採用し, モデルが取り得る立体配置を点にそれぞれ対応させることで配置空間を定義します。これは, モデルの立体配置の形状の違いを点同士の隔たりで見ると言えるものです。このチェーンモデルの配置空間は大きな分子になると取り扱うのが難しくなります。

チェーンの直鎖状モデルの配置空間においては, チェインの長さによって定義される配置空間上の実数値関数の臨界点を調べることを目的とします。

チェーンの環状モデルにおいては, 配置空間のトポロジー的な不変量である基本群に影響を与える立体配置の変形を調べることを目的の一つとします。さらに, 具体的な多面体的曲面の折り畳みを調べることで, 大きな環状分子のチェーンモデルの配置空間を小さな分子の場合の配置空間を用いて近似する方法を見つけることを目指しました。

3. 研究の方法

図形を輪切りにしてその断面の変化から, 元の図形の全体像を探るモース理論的な考え方に基づいて配置空間のもつトポジカルな性質を調べてゆくという方法を取ります。具体的には, 配置空間上の実数値関数の臨界点に対応するチェーンの配置の変位の過程を離散幾何学的手法を用いて調べることに帰着させます。その助けとして, 分子の数理モデルの剛体模型を製作します。チェーンの配置空間の研究当初は, 徳島大学工学部に特注したものを使用していました。この研究では3Dプリンタを用いて製作することを予定していましたが, 3Dプリンタを用いた場合, 作成時間が長くかかり過ぎること, 仕様を頻繁に変える必要に迫られたため, 3Dプリンタの使用を断念することになりました。1年目の後半からは, 代替案として十分な剛性の強度をもつ紙材料で作ったパネルをポリプロピレンのシートを用いた可動部分を設けてつなぎ合わせて得られる多面体的曲面モデルを採用しました。このことにより, チェインの折りたたみはパネル面のつなぎ目で折るという扱いやすい変形に視覚化され円滑に研究を進めることができました。私たちの取っている研究手法は, 具体的な多面体的曲面の折り畳みを調べる研究を積み重ねてゆくというものです。

チェーンの直鎖状モデルの配置空間において, チェイン長に関する臨界点を持つべき条件を調べ, その条件をもつ立体配置が存在するかどうかを剛体模型の助けを借りて, 離散幾何学的手法を用いて確認します。この後は臨界点を解析します。

チェーンの環状モデルにおいて, 得られた立体配置の変形が許されるかどうかをパネル曲面の境界が作る結び目・絡み目の不変量で判定します。変形が許される可能性がある場合には, 変形の様子を直接調べるために, 剛体模型を製作し, 変形過程のパラメータ表示を行います。回転可能なボンドをもつ場合にはこの後, 配置空間の基本群という位相不変量を評価します。立体配置の変形が配置空間のトポジカルタイプへ与える影響と配置空間上の実数値関数の臨界点の周りの状況は深く関係しています。いずれも, 与えられた条件を満たす立体配置が存在するか, 2つの立体配置の変形過程をある程度まで具体的に記述できるかといった立体配置とその変形を調べる議論へと帰着されます。立体配置とその変形を調べることはその構造のもつ特徴ごとに議論が全く異なる等, 非常に厄介で困難が伴います。まず多面体的曲面モデルを製作し考察の手助けにします。



多面体的曲面モデルの模型

4. 研究成果

直鎖状のチェーンに関連する研究成果として次の(1), (2), (3)を得ました。

(1) 直鎖状炭化水素分子の数理モデルである四面体角をボンド角とするストレートチェーンに対して、次の結果を得ました。数理モデルの配置空間において、5及び6本のボンドから成るストレートチェーンの長さの二乗により定義される関数を調べ、平面配置をもつ臨界点を決定しました。

(2) 直鎖状のチェーンを内包する Origami Spring と呼ばれるねじれをもつストレートチェーンを内在する多面的曲面の構造を調べ、円柱状の空洞をもつ穴あき Origami Spring と呼べるような構造を構成しました。その運動は1つのパラメータを記述され、オリジナルの Origami Spring はその特別な場合となります。

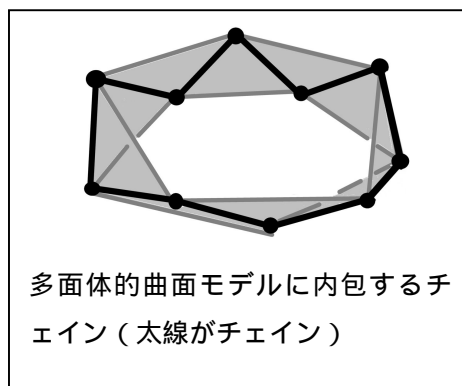
(3) 直鎖状のチェーンを内包するポップアップスピナーと呼ばれる折りたたみ構造は回転運動を生じます。内包する直鎖状のチェーンはボンド角固定チェーンであり、このチェーンは回転運動において、チェーン長が最短から最長へと変化します。どのように回転運動が生じるのかを説明するための単純な原理をひとつ提案しました。それはキャンディの包み紙に見られる原理です。この原理を用いて、らせん型円筒折り紙構造から、回転運動を生じる折り紙構造を構成し、ねじれと回転の関係性を調べました。



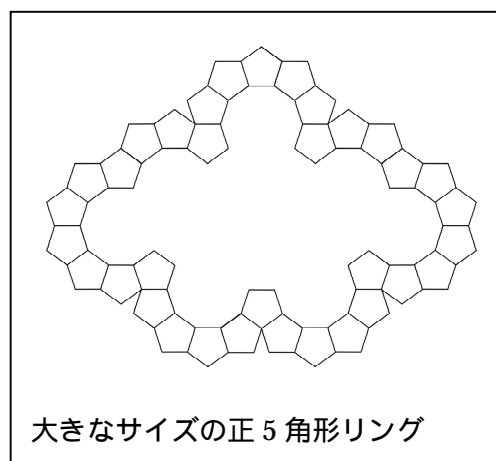
環状のチェーンに関連する研究成果として次の(4)-(7)を得ました。

(4) 環状炭化水素分子の数理モデルに対して、 n 本のボンドをもつ環状のチェーンでは、そのボンド角が n によって決まるある角度より大きく正 n 角形の内角に非常に近いとき、配置空間は多様体の構造をもち、その位相型が $(n-4)$ 次元球面と同相であるという結果を得ました。その証明においてキーとなる補題のひとつに、特定の局所配置をもつ環状のチェーンが実際に存在するかを判定するというものがあるが、その証明を改良し、より適応範囲を広げることができるようになりました。

(5) 偶数枚の直角二等辺三角形をつなぎ合わせて得られる環状の離散的曲面である多面的アニュラスを扱います。これはボンド角を 90° の角度固定環状のチェーンを内包します。多面的アニュラスが表裏を裏返す折り紙変形を許すとき、リバーシブルであるといえます。リバーシブルであるための、直角二等辺三角形の数の条件を調べ、6枚まではリバーシブルではなく、8枚以上ではリバーシブルであることを示しました。リバーシブルではない場合には、配置空間に2つの連結成分が得られることとなります。また、この多面的アニュラスではリバーシブルである場合には、回転可能なボンドをもつことも示され、配置空間の基本群が非自明という結果が得られます。



(6) 多角形を辺をヒンジとして、環状を成すようにつないだ構造はフレームワークと呼ばれる幾何学的な対象です。ボンド角を 108° の場合には、有限個の正五角形の辺を、つなぎ合わせて得られる多面的アニュラスを考えます。これを正五角形リングと呼ぶことにします。この正五角形リングの全ての正五角形が同一平面上にあるとき、平面的であるということにします。平面的であるという条件をもつ場合は再び変形をし直すことで、1つの正五角形の形に折り畳むことができることを示されました。この証明の副産物として得られた平面的な正五角形リングの構成法を用いると複数の形に折り畳み変形で再配置できる平面的な正五角形リングが構成されます。



(7) 多面体を辺をヒンジとして、環状を成すようにつないだ構造はフレームワークと呼ばれる幾何学的な対象のひとつである。この構造は環状分子の数理モデルとして見ると、動きの制約を受けて固定されている分子の一部を固まりとして捉えた構造を表現していると考えられることができる。そのような構造を調べるとつかかりとして8個の立方体をつないでリング状にしたキューブ・リングを考える。これはつなぎ目で折ることによりその形を変える。キューブ・リングの代表的な例には Infinity cube (無限展開キューブ) や Conway cube がある。キューブ・リングが立方体の形状に配置されたものを $2 \times 2 \times 2$ スタックと呼ぶ。Conway が出した問題に関

連して、変形を一直線状に並んだヒンジを軸として、その軸でだけ折るという折り変形に制限した場合に、 $2 \times 2 \times 2$ スタック間の変形について調べて、ダイアグラムというグラフを用いて表現する。このとき、「Infinity cube (無限展開キューブ)であることと、ダイアグラムが単一のループ状になることは必要十分である」という特徴付けることができた。

研究手法から副産物的に得られた研究成果として次の(8), (9)があります。

(8) 準結晶の数理モデルであるタイル貼りに関する次の結果を得ました。強非周期的なタイル貼りは、無限巡回群による対称性をもち得ない双曲平面タイル貼りとして定義されます。Margulis と Mozes により見つかったタイル、それは双曲平面タイル貼りを構成することはできませんが、構成される双曲平面タイル貼りの基本的領域はコンパクトでない双曲菱形タイルによる単一の頂点配置をもつ強非周期的双曲平面タイル貼りが同型に関して非可算無限種類のもを構成できるということを証明しました。

(9) しぼりをもつ立体折り紙構造をしぼりでつないでリング状の構造が得られるかどうかを調べた。角の数が偶数である球面多角形から成る球面タイル貼りから、しぼりをもつ立体折り紙である球形曲線折り紙が得られることを示した。実際に、二つの例において、球面タイル貼りから、球形曲線折り紙を作成した。特に、そのうちの一つではしぼりでリング状につなげることが可能となっている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Goto Satoru, Komatsu Kazushi, and Yagi Jun	4. 巻 50
2. 論文標題 The configuration space of almost regular polygons	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Hiroshima Mathematical Journal	6. 最初と最後の頁 185 ~ 197
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiromi Ei, Hiroko Hayashi and Kazushi Komatsu	4. 巻 31
2. 論文標題 On folding of planar regular pentagon rings	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nihonkai Mathematical Journal	6. 最初と最後の頁 45 ~ 58
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 江居宏美, 小松和志, 山内昌哲	4. 巻 1
2. 論文標題 偶数枚の直角二等辺三角形パネルから成る多面的アニュラスのリバーシブルについて	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientific and Educational Reports of the Faculty of Science and Technology, Kochi University	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 小松和志, 静川早希	4. 巻 4
2. 論文標題 キューブ・リングについての考察 (On Cube・rings)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific and Educational Reports of the Faculty of Science and Technology, Kochi University	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	後藤 了 (Goto Satoru) (50253232)	東京理科大学・薬学部生命創薬科学科・教授 (32660)	
研究分担者	江居 宏美 (Ei Hiromi) (60333051)	弘前大学・理工学研究科・准教授 (11101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------