

相転移・ソフトマターコロキウム

期日： 2024 年 12 月 20 日（金） 13:20-16:40

会場： 東京大学 駒場 I キャンパス 総合文化研究科（16 号館）107

アクセス：

キャンパスまで https://www.u-tokyo.ac.jp/ja/about/campus-guide/map02_02.html

会場まで https://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam02_01_15_j.html

13:20-14:20 荒木 武昭 （京都大学）

内部自由度を持たない系の Johari-Goldstein 緩和の微視的描像

Johari-Goldstein 緩和は過冷却液体やガラスで起こる副緩和の 1 つであり、より遅い構造緩和（ α 緩和）の前駆現象と考えられている。ガラス転移温度以下での衝撃強度などに関係すると考えられているが、実験、数値シミュレーションとも観測が難しく、その物理的機構はあまり理解されていない。その機構を解明すべく、球状に近いイオンガラス $\text{Ca}_4\text{K}(\text{NO}_3)$ を対象に Johari-Goldstein 緩和における原子運動を、X 線時間領域干渉法と分子動力学シミュレーションを用いて研究を行った。実験結果を再現した分子動力学シミュレーションの結果を詳細に解析したところ、Johari-Goldstein 緩和では、一部の原子が熱運動によって大きな移動を伴うジャンプ運動を起こし、さらにそのジャンプ運動が周囲の原子にジャンプ運動でない微小な協同運動を誘起することが分かった。これらの運動はいずれも系の力学緩和に寄与している。また、内部自由度を持たない金属ガラスについても分子動力学シミュレーションを行ったところ、同様なジャンプ運動によって誘起される微小な協同運動を観測し、これらの 2 つの運動様式が応力緩和に関わっていることを示した。我々が見出した緩和の機構が、内部自由度や回転自由度を持たない系の Johari-Goldstein 緩和の普遍的な描像を与えるものと考えている。

14:30-15:30 岡本 隆一 （兵庫県立大学）

溶液における添加物効果

溶媒中における溶質間有効相互作用は一般に添加物を加えることにより変化する。添加物の種類、あるいは添加物と溶質の親和性によって、枯渇効果、貧共溶媒効果、塩析/塩溶などと呼ばれる。例えば枯渇効果は溶質と非親和的な添加物を加えることにより、溶質間に引力が働く効果である。通常、これは溶質-添加物の排除体積効果に起因するエントロピックな引力として理解されている反面、現実には必ずしも純粋にエントロピックではないとの指摘もある。またイオンに関してはホフマイスター系列と呼ばれるイオン順列が知られている。本講演では、講演者らが発見した熱力学的恒等式に基づき、これらを統一的に理解する試みを紹介する。

15:40-16:40 平岩 徹也 (Institute of Physics, Academia Sinica, Taiwan)

Influence of mechanical perturbations due to actions of subnuclear molecules on chromatin organization and dynamics

Genetic information in a eukaryotic cell is stored in its chromatin, a polymer-like composite of DNA and proteins, densely packed within the nucleus. Physical spacing of chromatin is critical in regulating bio-chemical and transcriptional abilities of genes, and proper functionality of the genomic content depends on the nonrandom organization of chromatin. Meanwhile, in a living cell, other subnuclear molecules, such as enzymes like polymerase and topoisomerase, act to facilitate cellular functions. Mechanical perturbation due to such actions of molecules may affect the chromatin organization and dynamics. In this talk, I would like to explain our numerical-simulation studies about such effects, based on polymer-physics concepts and the GPU-aided computations, where we focused on a type of actions of molecules that we call catch-and-release action and implemented in the way inspired by a class of molecules like topoisomerase-II. I will share the results of our simulations on how it affects chromatin organization and dynamics. The results clarified (i) that the mechanical perturbation of such actions can modulate the phase separation organizations of chromatin called heterochromatic and euchromatic regions [1], and (ii) that the mechanical perturbation enhances fluctuating dynamics of inclusions in chromatin through the newly-proposed dynamic mode of chromatin remodeling [2].

[1] R Das, T Sakaue, GV Shivashankar, J Prost, T Hiraiwa (2022) “How enzymatic activity is involved in chromatin organization”, *eLife* **11**, e79901.

[2] R Das, T Sakaue, GV Shivashankar, J Prost, T Hiraiwa (2024) “Chromatin Remodeling Due to Transient-Link-and-Pass Activity Enhances Subnuclear Dynamics”, *Physical Review Letters* **132**, 058401.