

複雑な分子合成の困難さを数式で表現

概要

複雑な構造をつくるのは難しい一方で、破壊するのは簡単です。これは誰もが知っている事実かもしれませんが、しかし、この事実を自然現象に対する法則として表現できるでしょうか？

京都大学大学院理学研究科 小林郁海 修士課程学生 と 佐々真一 同教授は本研究において、ある単純な設定において、分子の合成にかかる時間についての新しい不等式を発見しました。この不等式によって、分子の合成速度には、材料の濃度をどれだけうまくコントロールしたとしても超えることのできない基本的な限界があることが分かります。そして、複雑な分子の合成は破壊に比べて圧倒的に時間がかかることも示されました。今後はこの研究成果を出発点として、より一般的な物質合成の難しさを計算できる新しい理論へと発展させていくことが期待されます。

本成果は 2022 年 6 月 14 日（現地時刻）に米国の国際学術誌「Physical Review Letters」にオンライン掲載されました。

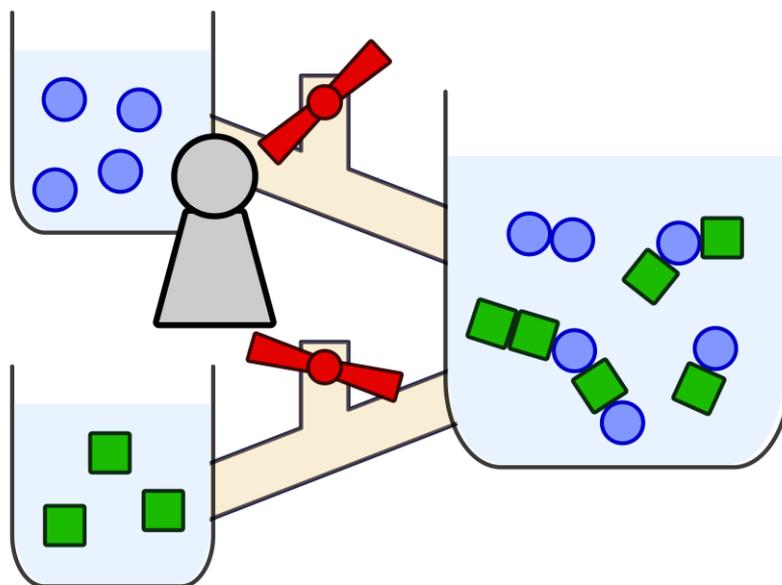


図1：本研究で考察した分子合成のイメージ図。2種類の材料分子をつなげて、1次元の鎖をつくる。

1. 背景

物理学の世界には、「どれだけ頑張ってもできないこと」を教えてくれる理論があります。「第2種永久機関^{注1}はどう頑張っても作製できない」という熱力学第2法則はその代表例です。このできないことを数式で表現することから、熱的性質と力学的性質が系統的に記述される熱力学が生まれました。一方で、自然現象をみわたすと、「できそうもないこと」が溢れていることに気づきます。例えば、死んだ生き物を元にもどすことはできません。これは熱力学で議論できる現象ではありません。生きている状態に対応する生体内の化学反応が、ある種の状態になってしまうと元に戻せなくなると解釈されます。私たちには、この「できそうもないこと」をも物理法則として定式化するという大きな目標があります。

この目標に向かって研究をすすめるには、できるだけ簡単でありつつ本質をとらえた設定を考える必要があります。ここで、ジグソーパズルを思い出しましょう。完成したジグソーパズルを壊すのは簡単ですが、ジグソーパズルを完成させることは難しいです。その理由は、しかるべき場所にしかるべきピースがあることを見出すのに時間がかかるからです。この考えは、複雑な物質を合成するときにも適用されると予想されます。その場合、「物質を組み立てる難しさ」は自然現象の法則として表現されるはずですが、単純な設定においても、その法則を見つけることが課題となります。

2. 研究手法・成果

本研究では、1次元の分子鎖について分子合成の難しさを定量化する枠組みを提供し、その枠組みの中で分子合成の基本限界を証明しました。2種類の材料分子 A・B を鎖のようにつなげて、1次元の分子鎖（例えば ABAAAB）をつくることを考えます。このとき、注入する材料分子の濃度をうまくコントロールすることで、ほしい構造を持った分子鎖をできるだけ効率よく合成することを考えます。この状況のもとでまず、「分子鎖をつくることの難しさ」を一定量の分子鎖をつくるのにかかる時間で測定することを提案しました。そして次に、どれほど上手いコントロールをしたとしても超えられない、合成時間の限界を証明しました。つまり、どれほど巧妙な組み立て作業をしたとしても、ある構造を持った分子をつくるのには最低でも一定以上の時間がかかってしまうことを不等式で表現しました（図2）。

そして重要かつ新しいこととして、その最短合成時間が分子鎖の持っている「かたまり具合」によって特徴づけられることが分かりました。同じ種類の材料が連続する大きなかたまりがない鎖（例えば、AABABABB...）の合成は、かたまりのある鎖（例えば、AAAAABBBBB...）に比べてはるかに困難です。また、前者のような分子鎖については、合成にかかる時間が破壊にかかる時間に比べて圧倒的に長くなることもわかりました。以上の結果は、1次元分子鎖においては、大きなかたまりの有無が構造の複雑さのひとつの基準となりうることを示しています。そして、大きなかたまりを持たない複雑な分子について、どのような操作をしたとしても合成は破壊よりも圧倒的に時間がかかることを示したことになります。

3. 波及効果、今後の予定

本研究ではまず、分子を合成・破壊することの難しさを定量化するひとつの枠組みを提示することができました。そして、その枠組みのなかで、複雑な分子の合成が破壊に比べて圧倒的に難しいことを不等式を使って証明することができました。一方で、本研究は1次元の分子鎖に対象が限定されています。今後はこの研究成果を出発点として、より一般的な物質合成の難しさを計算できる新しい理論へと発展させていくことが期待されます。

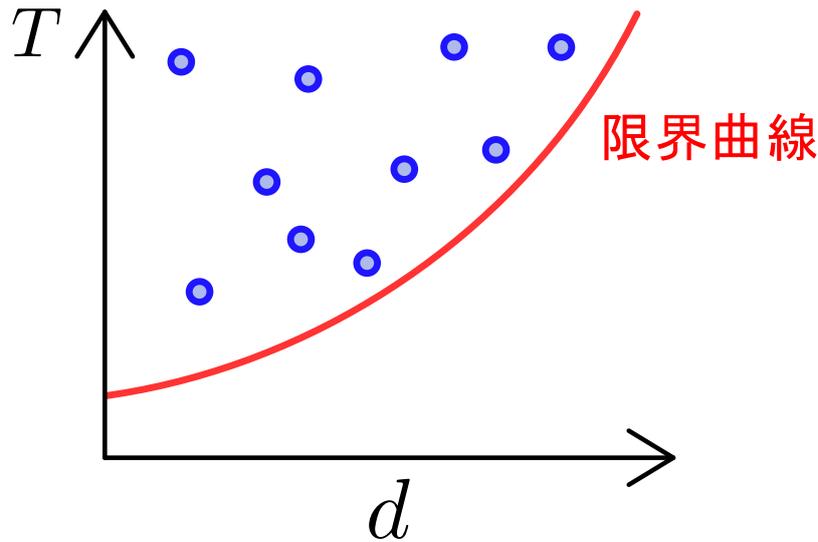


図2：合成時間の限界のイメージ図。合成にかかる時間 T を1次元分子鎖に含まれるAとBの接続の数 d に対してプロットする。このとき、どれほど工夫をしても超えることのできない限界曲線がある。

4. 研究プロジェクトについて

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金（科研費番号 17H01148, 19H05795, 20K20425）の支援を受けて行われました。

<用語解説>

注1 第2種永久機関：温度が一定の熱浴（装置の周りにある空気など）から正の熱を奪い、他には何の変化を残すことなく、それをそのまま仕事に変換するサイクル過程を実現する装置のことです。第2種永久機関があれば、大気や海水からエネルギーをとってエンジンを回すことができますが、そういう装置をつくることのできないのです。不思議に思うかもしれませんが、「できないこと」を定式化することで、自然現象について新しい定量的予言をすることができるようになります。

<研究者のコメント>

「大学で物理学を専攻し、現代の物理学のめざましい発展に感動しました。しかしそれと同時に、日常生活のなかで感じる素朴な疑問のなかにも、学問的にほとんど理解されていないものが山ほどあることを痛感しました。そういった、一見素朴だけど理解の進んでいない問題に真摯に取り組んでいくことで、科学の全体的な発展に貢献できたら嬉しいです。」（小林郁海）

「生きている状態と死んでいる状態の非対称性を化学反応ダイナミクスの立場から研究したいと思ってきましたが、これまで研究の端緒を開くことができませんでした。今回の研究で、その大きな目標に向かって重要な一歩を踏み出したように思います。今後の展開が楽しみです。」（佐々真一）

<論文タイトルと著者>

タイトル: Characterizing the Asymmetry in Hardness between Synthesis and Destruction of Heteropolymers (ヘテロポリマーの合成と破壊の難しさの非対称性を特徴づける)

著者: Ikumi Kobayashi and Shin-ichi Sasa

掲載誌: Physical Review Letters DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.247801>