

内22-76

早稲田大学大学院理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

シュレーディンガーによって提唱された
時計仕掛け仮説の熱力学的検討

A Thermodynamical Study of the Clockwork Hypothesis
Proposed by E. Schrödinger

申 請 者

塩 満 栄 司

Eiji Shiomitsu

物理学及応用物理学専攻 理論生物学研究

2003 年 1 月



これまで、「生物時計」の分子機構が盛んに研究されて来ており、その結果、「生体系自体が時計仕掛けの構造を持っているのではないか」という考え方が、次第に生長して来た。しかし、シュレーディンガーの「時計仕掛け」仮説は、今から約 60 年前、「生物時計」の研究がまだ始まっていない時期に、次のような彼独自の考え方に基づいて、立論されたものである：(1) 一つの遺伝子に含まれる原子の個数は、たかだか数百万と考えられるが、統計熱力学的な描像では、この程度の個数の原子集団が「秩序正しく規則的に振舞う」ことを、合理的に説明することが出来ない；(2) 生体の最も著しい特徴は、それが「秩序から秩序への原理」に基づいている所にある；(3) 生体系は、「負エントロピーを食べる歯車」を構成要素として、「時計仕掛け」の構造を成しているものと考えられる。

思い起こせば、熱機関中の作業物体は、「負エントロピー状態」で作動する「不可逆サイクル」であり、シュレーディンガーの「歯車」がある種の「不可逆サイクル」であることを、強く示唆するものである。しかし、この「歯車」は次の二つの点において、熱機関中の作業物体と根本的に異なっている：(A) この「歯車」では化学物質の出入りもある；(B) 生体系はほぼ一定の温度や圧力を維持しており、そこには熱機関の高温熱源・低温熱源に相当するものが全く存在しない。

そこで本論文では、これら二つの要件 (A)・(B) を重視し、1 成分開放系の熱力学に基づいて、シュレーディンガーの「歯車」がある種の「不可逆サイクル」をなすものであること、またこの不可逆サイクルによって、彼の「歯車」とその環境体との間に、一方向性の分子・エネルギー・エントロピーの移動が引き起こされることを、具体的かつ一般的に明らかにした。更に、生命の本質とも言える「概日リズム」にも注目して、今後その機構を物理学的に把握するためには、シュレーディンガーの「時計仕掛け」仮説の伸展が不可欠であること、また本論文の理論が今後どのように拡張されねばならぬかを、明確に説明した。

本論文は六つの章から構成されている。第 1 章では、本研究の背景となるシュレーディンガーの次の三つの提言について、説明した：(a) 遺伝子の実体を究明して遺伝の仕組みを解明すること；(b) 「生物は負エントロピーを食べて生きている」という観点から、生体系の構成要素である諸不可逆系の秩序性を把握すること；(c) 生体系全体の秩序性は、「負エントロピーを食べる歯車」から構成される「時計仕掛け」構造によって支えられていると思われるので、その是非を検証すること。提言 (a) の意義については、従来の分子生物学の発展を見れば、もはや説明の必要がないであろう。提言 (b) の真意は、「生体内の物質・エネルギーの代謝系では、その外部に放出されるエントロピー ΔS_0 が、その内部に吸収されるエントロピー ΔS_i を上回っている ($\Delta S_i - \Delta S_0 < 0$)」ことを主張したものであり、鈴木らはこの不等式をシュレーディンガー不等式と呼んで来た。提言 (c) は冒頭のシュレーディンガーの考え方 (1)・(2) に基づいて立論されたものであり、本論文で検討されたのは、このシュレーディンガーの「時計仕掛け」仮説である。

第2章では、実際に生体系の検討に入るに先立って、その基盤となる熱機関の論理を概観した。まず、単に二つの物体を接触させるだけでは、外部に対してなす仕事を得られないことを考察して、なぜ熱機関では高温熱源と低温熱源との間に作業物体が介在しなければならないか、その理由を確かめた。次に、シュレーディンガー不等式と全く同一の形式・内容をもつクラウジウスの不等式が、熱機関におけるエントロピー・エネルギーの一方向性移動に対する基本方程式であること、しかもその必要・十分条件が作業物体のなすサイクリックな不可逆的状态変化であることを、簡潔に説明した。即ち、熱機関中の作業物体 A が温度 T_i の高温熱源 A_i からエントロピー ΔS_i (従って熱量 Q_i) を吸収して始動し、不等式 $\Delta S_i - \Delta S_o < 0$ を満たすエントロピー ΔS_o (従って不等式 $Q_o < Q_i$ を満たす熱量 Q_o) を温度 T_o の低温熱源 A_o に放出して、自らが再び始めの状態に戻るならば、残りの熱量 $Q_i - Q_o$ はこのエントロピー移動に便乗して、外部への仕事 W に円滑に転化されるのである。また、作業物体 A が不可逆サイクル (即ちサイクリックな不可逆的状态変化) を行なうことは、不等式 $\Delta S_i - \Delta S_o < 0$ の十分条件でもあるのである。

このような、熱機関中の作業物体の役割は、「負エントロピー」を食べて作動するシュレーディンガーの「歯車」がある種の「不可逆サイクル」であることを、強く示唆するものである。そこで第3章では、生体系の構成要素である諸「不可逆系」が次の二つの点において、熱機関中の作業物体と根本的に異なることに、まず注意した：(A) これらの「不可逆系」では、エネルギー・エントロピーのやり取りのみならず、化学物質の出入りもある；(B) 生体系には、熱機関の高温熱源・低温熱源に相当するものが全く存在せず、その体系を構成する諸「不可逆系」がほぼ一定の温度や圧力を維持している。次に、1種類の分子だけを考えて、三つの1成分開放系 (A_i, A, A_o) からなる孤立系 A_Σ を想定し、その構成分子と同一のものが外部から A_i へ準静的に流入するものとして、この流入によって A_Σ 内に引き起こされる分子・エネルギー・エントロピーの一方向性の流れに注目した。そして、この流れを開放系の熱力学に基づいて定式化し、その基本方程式がシュレーディンガー不等式 $\Delta S_i - \Delta S_o < 0$ であること、しかもその必要・十分条件が A のなす不可逆サイクルであることを、明らかにした。さらに、この不等式 $\Delta S_i - \Delta S_o < 0$ を満足する「不可逆サイクル」が、シュレーディンガーの提唱した「負エントロピーを食べて作動する歯車」に相当していること、従ってこのような「不可逆サイクル」から構成される体系が、「時計仕掛け」の構造をもつと言えること、などに注意して、彼の「時計仕掛け」仮説の妥当性を確認した。また、A が任意の不可逆的状态変化を行なう場合、A のなす最大仕事の大きさがエクセルギーの変化と密接に関連しており、ギブズ自由エネルギーの変化とは「似而非者」であることを、指摘した。

しかし、第3章における上記の検討では、1成分開放系 A の行なう状態変化の

具体的な道筋が、何一つ考慮されなかった。そこで第4章では、まずAが三つの示量変数（モル数 N 、体積 V およびエントロピー S ）を持つものとし、かつそれらがそれぞれ二つの値を取ると仮定して、Aが行なうサイクリックな状態変化の径路を、グラフ理論に基づいて整理した。そして、その必要最小限の基本的径路が、独立な六つの状態を巡る、6ストロークの有向閉路であることを示した。次に、Aにおける微小なエントロピー変化などを具体的に論ずるために、「理想溶液近似」に従って、微小な示量・示強両変数変化の間の関係式を導いた。そして、微小な示量変数変化が例えばほぼ $(\Delta N, \Delta V, \Delta S)$ の順序で起こるような6ストロークの開路・閉路に注目し、シュレーディンガー不等式の必要・十分条件がAのなす不可逆サイクルであること、またこの不可逆サイクルによって、Aとその環境体 (A_i, A_o) との間に、一方向性の分子・エネルギー・エントロピーの移動が引き起こされることを、具体的かつ一般的に明らかにした。

第5章では、概日時計の分子機構に対する従来の研究成果を、「時計仕掛け」仮説の観点から考察した。概日時計は自律振動を行ない得るものであるが、その周期や波形などは外界の明暗の変化に直ちに同調する。従って、その光同調の最初の段階で働く光受容分子に注目すると、「光受容サイクル」が必ず存在する筈である。そして、時計遺伝子の発現の各過程は、それぞれ特定の不可逆サイクルによって担われており、それらが適当に連携しながら、この「光受容サイクル」に連結していると思われる。本章では、このような観点から、シュレーディンガー不等式を満たす不可逆サイクルが幾つか連結されている場合を取り上げ、この連結系全体についてもシュレーディンガー不等式が成り立つことを、数学的帰納法により一般的に証明した。

最後に、第6章では、今後我々が「時計仕掛け」機構の論理について、如何なる物理学的研究を行なわねばならぬかを勘考した。すなわち、我々はまず第一に、本研究で展開された1成分開放系に対する熱力学的理論を、二つまたは三つの不可逆サイクルが連結された場合へ拡張しなければならない。第二に、第3章の理論を2成分開放系の場合に拡張しなければならない。第三に、この第二の問題を、二つまたは三つの不可逆サイクルが連結された場合へ拡張しなければならない。第四に、第三の問題を第4章の考え方に従って具体的に構築し直さなければならない。最後に、鈴木らが提唱しているエントロピーベクトル場の基本方程式に注目し、第四の問題に沿って完成された熱力学的理論に基づいて、その根拠を具体的に検討しなければならない。