(P09) 膜輸送や分子モータのモデルにおけるポンプ・カレントと幾何学的位相

大久保 潤

東京大学 物性研究所

E-mail: ohkubo@issp.u-tokyo.ac.jp

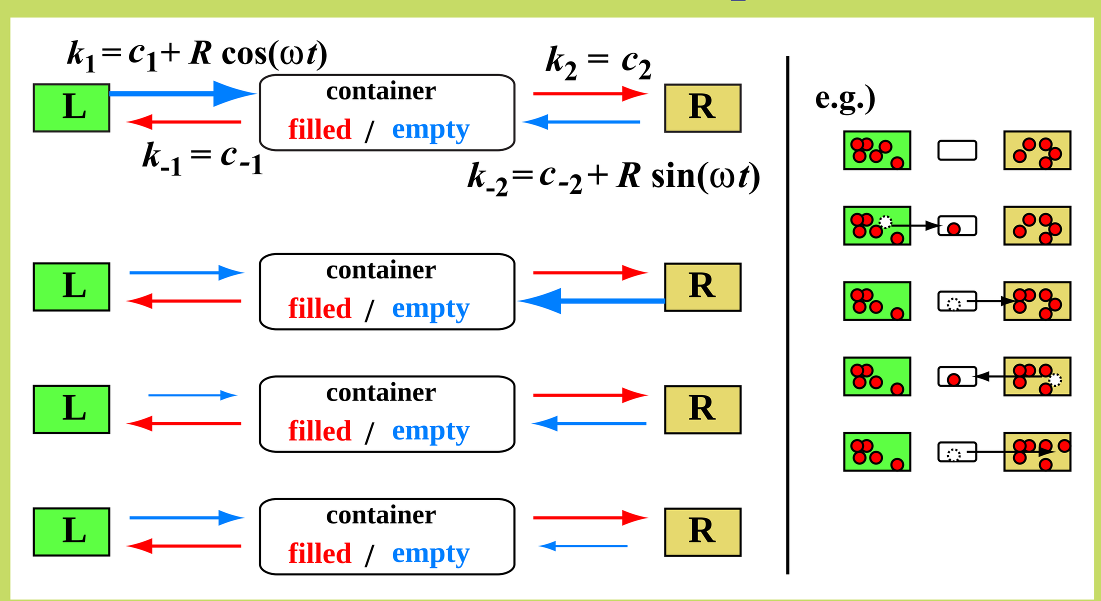
要約:

- 周期的に変化する化学反応系におけるポンプカレント（流れ）
  $\Rightarrow$ 「流れ」を（幾何学的）位相の概念を用いて計算できる
- 空間の階層性 $\Rightarrow$ 「状態」と「過程」の階層性
- 幾何学的位相を使う利点
  - Floquet理論を使用することにより，具体的な計算が可能
  - 数学的な概念（ファイバー束）との対応がつく
  - 様々な新しい展開が見込める（？）

はじめに

- 扱う問題 ··· Stochastic Pump
  - 膜輸送や分子モータと関連したモデルに潜む「数理」
  - 例えば「膜輸送の問題」（細胞の「内部」と「外部」）
    $\Rightarrow$ 空間的な階層性（内部・外部）の問題とのつながり
- 流れには２種類ある
  - 古典的な流れ: 反応速度定数の差から生じる
  - ポンプ・カレント: 反応速度定数の周期的な変化から生じる
- 階層性の問題と関連して··· 「状態」と「過程」という階層性

モデルの説明: Stochastic Pump



- 粒子浴 [L] と [R] は変化しないと仮定 (十分に大きい)
- container は粒子を１つまでしか含むことができない
- 反応速度定数が時間変化する:

$$k_1 = c_1 + R\cos(\omega t) \qquad k_{-1} = c_{-1}$$
$$k_2 = c_2 \qquad k_{-2} = c_{-2} + R\sin(\omega t) \tag{1}$$

(c_i: 定数, R: 振動の振幅, ω: 周波数, T: 周期 ($\omega = 2\pi/T$))

- containerが空のときは，[L]または[R]から粒子が一つcontainerに移動できる
- containerに粒子が入っているときは，[L]または[R]にその粒子は放出される

問題意識: ポンプ・カレントについて

- 反応速度定数が時間変化しない場合 ($R = 0$):
  $\Rightarrow$ 反応速度定数の差に応じて「流れ」が生じる:

$$j_{\mathrm{cl}} = \frac{c_1 c_2 - c_{-1}c_{-2}}{c_1 + c_{-1} + c_2 + c_{-2}} \tag{2}$$

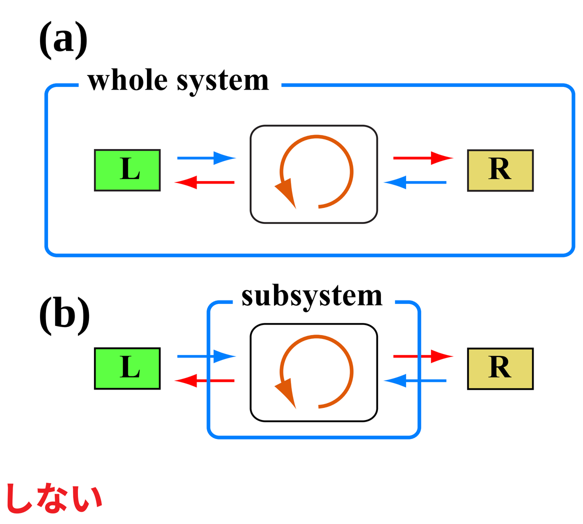
- $c_1 = c_2 = c_{-1} = c_{-2} = c$ のとき，古典的な流れ j_{cl} は生じない
- k_1 の時間平均は $\langle k_1 \rangle = c$ であり，また $\langle k_{-2} \rangle = c$ である
  - 素朴に考えれば，平均的には流れは生じない: $\langle j_{\mathrm{cl}} \rangle = 0$
  - 実際は j_{cl} 以外に流れが生じることが知られている
    $\Rightarrow$ ポンプカレント
  - こういった「流れ」の問題を解析的・数理的に扱うには？

階層性の問題

- システム全体を取り扱うのは難しい状況（または不適切）
  $\Rightarrow$ システムの一部分 (subsystem) に着目
- その subsystem は外部とも関係がある
  $\Rightarrow$ subsystem と外部とのやり取りをどう扱うか？
- subsystemが周期的な変化をする場合を考える

(a) 全体を考えた場合
- 系全体の状態 $\Rightarrow$ 確率過程
- 反応速度定数の周期的な変化
  $\Rightarrow$ 系全体の状態は変化する
- 「流れ」 $\Rightarrow$ 状態の変化に対応

(b) 一部分のみに着目した場合
- subsystemの状態 $\Rightarrow$ 確率過程
- 反応速度定数の周期的な変化
  $\Rightarrow$ subsystemの状態は元に戻る
- 「流れ」 $\Rightarrow$ 状態の変化には反映しない



- 1周期で元に戻る「状態」と，外部とのやり取りという「過程」との間に，どのような数理的なつながりが存在するのか？
- 「系全体」と「subsystem」という空間的階層性の問題
  $\Rightarrow$ 「状態」と「過程」という階層性と見ることもできる

これまでの関連する研究

- （少し体系は異なるが）実験的研究とその解析 (例えば [1])
  $\Rightarrow$ 統一的な観点・取り扱いの模索の必要性
- 断熱的時間発展 ($\omega \ll 1$) の場合の解析 [2,3]
  $\Rightarrow$ Berry 位相との関連性が指摘された
- 一般的な ω に関する研究 $\Rightarrow$ 本発表 [4,5]

母関数による流れのカウント

- 着目する「状態」: container が filled か empty かどうか
  (subsystem の状態変化のみを記述し，粒子浴の情報を持たない)

$$\mathbf{p}(t) = \begin{bmatrix} P_{\mathrm{e}} \\ P_{\mathrm{f}} \end{bmatrix} \tag{3}$$

- container から [R] への粒子の移動がn回の確率 P_n の特性関数:

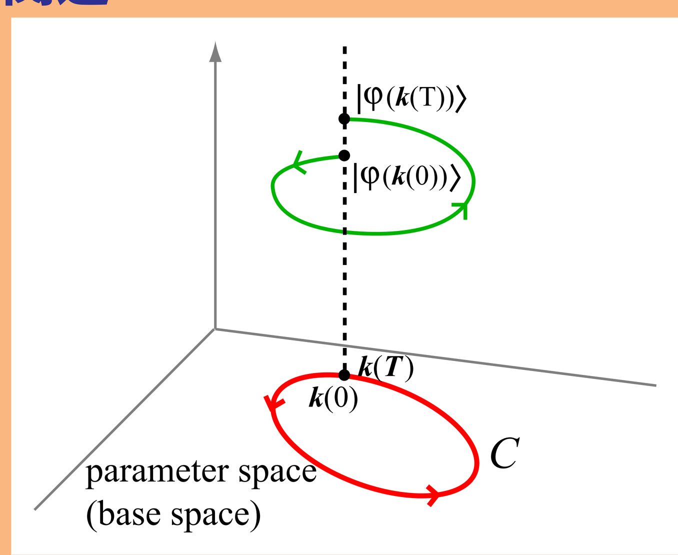
$$Z(\chi) = e^{S(\chi)} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} P_{n=s} e^{is\chi} = \mathbf{1}^{\dagger}\hat{T}\left(e^{-\int_0^T \hat{H}(\chi,t)dt}\right)\mathbf{p}(0) \tag{4}$$

$$\hat{H}(\chi,t) = \begin{bmatrix} k_1 + k_{-2} & -k_{-1} - k_2 e^{i\chi} \\ -k_1 - k_{-2}e^{-i\chi} & k_{-1} + k_2 \end{bmatrix} \tag{5}$$

- $S(\chi)$ の微分から流れに関する統計量を計算できる:
  流れの平均: $\langle n \rangle = -i\partial S(\chi)/\partial\chi|_{\chi=0}$.

ファイバー束との関連

(ファイバー束について)
反応速度定数 k_i (今の場合は k_1 と k_{-2})は，パラメータ空間 C 上を一周して元の状態に戻る．しかし，以下で説明するような時間発展の観点から特性関数を見た場合，状態 $|\phi(t)\rangle$ は最初の状態には戻ってこない．実際には位相 $\mu(\chi)$ の分だけずれる．このような現象を数学的に表現する形式がファイバー束である．



- 特性関数を次のような観点で見る:
  $H \equiv -i\hat{H}(\chi,t)$ と定義すれば，

$$i\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle = H|\phi(t)\rangle \tag{6}$$

という時間発展を考えていることになる

- 状態の周期的な変化による位相の導入: 周期 T として，

$$|\phi(T)\rangle = e^{i\mu(\chi)}|\phi(0)\rangle \tag{7}$$

$\Rightarrow$ T 時刻後には，位相 $\mu(\chi)$ が付く

- 位相から，単位時間当たりの流れは

$$J_{\mathrm{total}} = \frac{1}{T}\frac{\partial\mu(\chi)}{\partial\chi}\bigg|_{\chi=0} \tag{8}$$

と計算できる

Floquet理論: 具体的な計算のために導入

Floquet の定理:
微分方程式系 $\dot{x}(t) = W(t)x(t)$ に対して ($W(t)$は周期 $\tilde{t}$ とする)．
もし $\dot{A}(t) = W(t)A(t)$ であるならば，
行列 A は基本行列 (fundamental matrix) と呼ばれる．
この時，$A(t) = B(t)e^{Ct}$ となるような
周期 $\tilde{t}$ の行列 $B(t)$ と，定数行列 C が存在する

- Floquet理論を用いることで具体的な計算が可能になる（計算の詳細はここでは省略）
- ポイント: ２つの基本行列を用いる
  - 時間発展演算子 $U(t) = V(t)e^{iMt}$ ($U(0) = I$)
  - 基本行列 $F(t) = P(t)e^{iQt}$
    (ある基底を用いた時に Q が対角行列になるようなもの)
- $U(t)$ に対して具体的に $V(t)$ などを決定するのは困難だが，$F(t)$ はFourier解析と相性が良いため，具体的な計算が可能になる
- Floquetハミルトニアン H_{F} を導入する

$$\langle\alpha', n|\, H_{\mathrm{F}}\, |\beta, m\rangle = H^{(n-m)}_{\alpha'\beta} + n\omega\delta_{\alpha'\beta}\delta_{nm} \tag{9}$$

$$H^{(n)} = \frac{1}{T}\int_0^T He^{-in\omega t}dt \tag{10}$$

- $R = 0$ の時，H_{F} が 2×2 行列にブロック対角化でき，その固有状態は2つ($+$ 状態と $-$ 状態の2つ)
  $\Rightarrow$ 理論の整合性から，$+$ 状態を使う
- 一般には ($R \neq 0$) ブロック対角化できないため，摂動計算する

(幾何学的)位相と流れの関連

- 時間発展方程式 (6)より，位相 μ_+ が求まる
  $\Rightarrow$ 位相 μ_+ から，全体の流れ J_{total} が求まる
- 従来の量子力学における幾何学的位相の議論から，全体の位相 μ_+ は2つの部分にわけられることが知られている

$$\mu_+(\chi) = \gamma_+(\chi) + \delta_+(\chi) \tag{11}$$

δ_+ : dynamical 位相
γ_+ : Aharonov-Anandan 位相

- dynamical 位相:

$$\delta_+(\chi) = -\int_0^T \langle\widetilde{\phi}_+(t)|H|\phi_+(t)\rangle dt \tag{12}$$

- Aharonov-Anandan 位相:

$$\gamma_+(\chi) = \int_0^T \langle\widetilde{\phi}_+(0)|i\widetilde{V}^{\dagger}(t)\dot{V}(t)|\phi_+(0)\rangle dt \tag{13}$$

- それぞれ，古典的な流れとポンプ・カレントに対応する

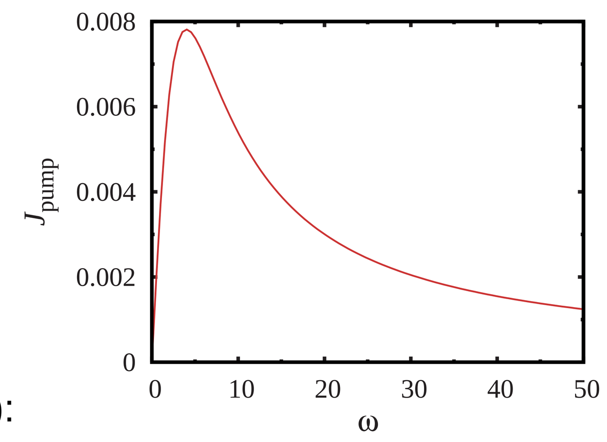
$$J_{\mathrm{cl}} \equiv \frac{1}{T}\frac{\partial\delta_+(\chi)}{\partial\chi}\bigg|_{\chi=0} \tag{14}$$

$$J_{\mathrm{pump}} \equiv \frac{1}{T}\frac{\partial\gamma_+(\chi)}{\partial\chi}\bigg|_{\chi=0} \tag{15}$$

古典的な流れがない場合の結果

- 古典的な流れがない場合
  $\Rightarrow c_1 = c_{-1} = c_2 = c_{-2} \equiv c$
- ポンプ・カレント:

$$J_{\mathrm{pump}} = \frac{1}{4}R^2\frac{\omega}{16c^2 + \omega^2}$$



- 断熱的時間発展の場合 ($\omega \ll 1$):
  $\Rightarrow J_{\mathrm{pump}} \propto \omega R^2$
  $\Rightarrow$ Berry 位相を用いて計算した結果 [2,3] と一致
- 非断熱的な発展の場合 $\Rightarrow$ ある周波数 ω でピークを持つ
- 実験的に観測されているポンプ・カレントの振る舞い [1] と同じ
  $\Rightarrow \omega \gg 1$ で $\sim 1/\omega$ の減衰

議論と展望

- Aharonov-Anandan 位相がポンプ・カレントに対応していることを示した($\omega \ll 1$ の場合は Berry 位相)
- この定式化により，流れの平均値だけではなく，高次のキュムラントも計算可能
- これまで量子力学において発展してきた手法を応用できる
  $\Rightarrow$ 非断熱的時間発展における Floquet 理論の応用によって，具体的に計算を実行できる
- 幾何学的位相・ファイバー束という概念で状態の変化に伴う「流れ」を取り扱うことができる
  $\Rightarrow$ 統一的な観点から現象を調べることが可能になると期待
- 「状態」と「過程」という階層性の問題
  $\Rightarrow$ ファイバー束・幾何学的位相が1つの手段になるのでは？
- 計算の手段としての「幾何学的位相」「ファイバー束」ではなく，そこから新しい現象が見えてこないか？

参考文献

[1] R. D. Astumian, *Phys. Rev. Lett.* **91** 118102 (2003).

[2] N. A. Sinitsyn and I. Nemenman, *Europhys. Lett.* **77** 58001 (2007).

[3] N. A. Sinitsyn and I. Nemenman, *Phys. Rev. Lett.* **99** 220408 (2007).

[4] J. Ohkubo, *J. Stat. Mech.* P02011 (2008).

[5] J. Ohkubo, Preprint: arXiv:0712.4105.