

## 【基礎】単純拡散

**概要：** 拡散とは、 $t=0$  に空間の 1 点に集中していた物質が時間経過とともに広がり、非常に長い時間の後には物質は空間全体に一樣に分布する現象です (図 1 上)。たとえば細胞内の一か所で合成された水溶性タンパク質が広がってゆく現象は拡散で表現されます。図 1 下のグラフは 1 次元の拡散で、時間とともに物質の分布がどのように変化するかを示しています。横軸は距離、縦軸は濃度です。 $t=\tau$  では中心付近の狭い領域に局在していますが、時間の経過とともに領域全体に広がるのがわかります。総物質量は保存するので、ピーク濃度 (中心の濃度) は低下します。

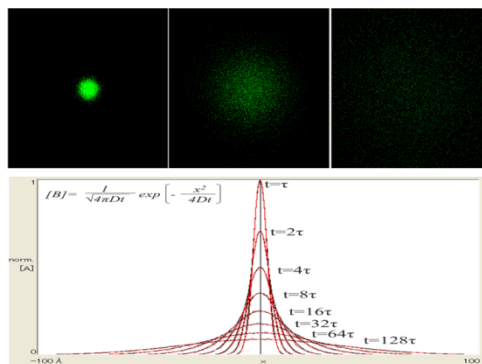
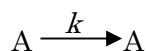


図 1 拡散の現象

**ポンチ絵と A-Cell モデル：** 拡散を A-Cell でモデル化するのは非常に簡単です。A-Cell の 3D モデル構築ウィンドウで、形態作成→反応式割付→初期濃度・拡散係数設定、の手順を踏めばできます。拡散シミュレーションでは物質だけが割り付ければよいのですが、A-Cell では物質のみを割り付けることを許していないので、次のダミーの反応式を作成し、



拡散させたい領域全体に割り付けます。ポンチ絵を描くことができないくらい単純です。 $k$  の値は何でも良いですが、一応  $k=0$  を設定します。拡散定数の設定 (ここでは一般的なタンパク質の拡散定数  $10^{-11} \text{m}^2/\text{s}$  を設定) と  $t=0$  における濃度の設定を行います (ここでは図 2 左の中心の赤いコンパートメントの濃度を  $1 \mu\text{M}$  に、それ以外を 0 としました)。円盤の直径は  $1 \mu\text{m}$  で直径を 51 分割しました。この後は A-Cell からシミュレーションプログラムと初期設定ファイルを生成すればシミュレーションができます。結果を図 2 右の通りです。シミュレーション結果の見た目は面白くないですが、 $t=0$  で中心のコンパートメントに局在していた物質が時間の経過とともに急激に拡散して一樣になっていく様子がわかります。

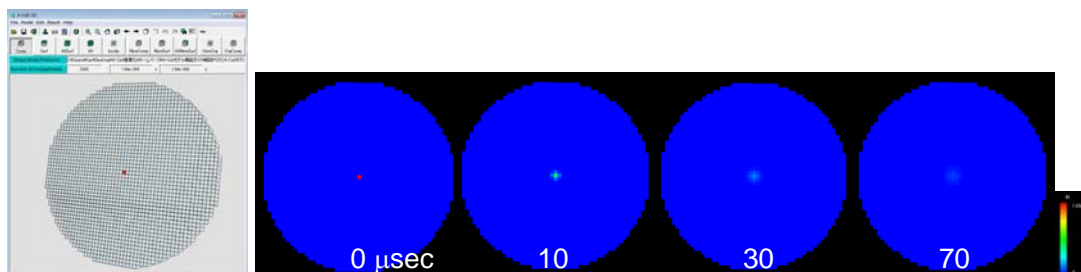


図 2 単純拡散の A-Cell モデル(左)とシミュレーション結果(右)

**文献：** 米沢富美子、「ブラウン運動」、共立出版、1986、ISBN-10: