

枯渇相互作用による凝集現象の MONTE CARLO SIMULATION

工藤雄貴*, 山本隆夫**

*群馬大学大学院理工学府 分子化学部門 理論物理化学研究室

[〒376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1]

**群馬大学大学院理工学府 理工学基盤部門

1. 緒言

枯渇相互作用とは、溶液中の粒子の局所的な濃度差によって生じるエントロピー由来の引力であり、1958年に朝倉・大沢¹⁾によって提唱された。

本研究では枯渇相互作用をする粒子系を格子模型²⁾で記述し、この凝集現象を調査した。

2. シミュレーション方法

各格子点 \mathbf{r} は巨大分子が入っている $Q=1$ の状態と二成分溶媒が入っている $Q=0$ の状態のいずれかをとるものとする。枯渇相互作用は、 $Q=0$ の格子点の両側の格子点が $Q=1$ であるときに発生する。また、生じる枯渇相互作用が x, y, z 方向の全てで独立であるとし、ハミルトニアン H を以下のように表した。

$$\frac{H}{k_B T} = J \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{e}} [Q(\mathbf{r}-\mathbf{e})(1-Q(\mathbf{r}))Q(\mathbf{r}+\mathbf{e})] - h \sum_{\mathbf{r}} Q(\mathbf{r})$$

ここで、 k_B はボルツマン定数、 T は温度、 J は枯渇相互作用の強さ、 \mathbf{e} は単位ベクトル、 h は巨大分子の化学ポテンシャルである。シミュレーションで変更するパラメータとして J と h を設定した。格子体積を 40^3 、 J を $0 \sim 2.0$ 、 h を $-1.0 \sim 1.0$ とした。このときに巨大分子の濃度 $\langle Q \rangle$ を求め、さらに濃度のゆらぎ $\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$ を求めた ($\langle \dots \rangle$ は熱平均)。

3. シミュレーション結果

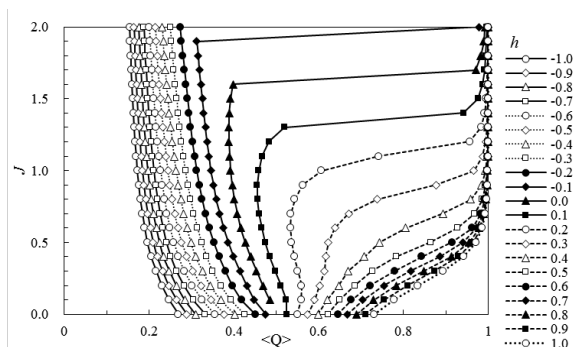


Fig 1. Relationship between J and $\langle Q \rangle$

h を固定し、 J を変化させたときの $\langle Q \rangle$ の変化と、そのときのゆらぎの変化を図 1 および図 2 に示し

た。 J の大きい領域において $\langle Q \rangle$ の値に飛びが見られ、相分離が生じた。また $h=0.1$ および 0.2 のとき、ゆらぎの値に大きなピークが見られた。

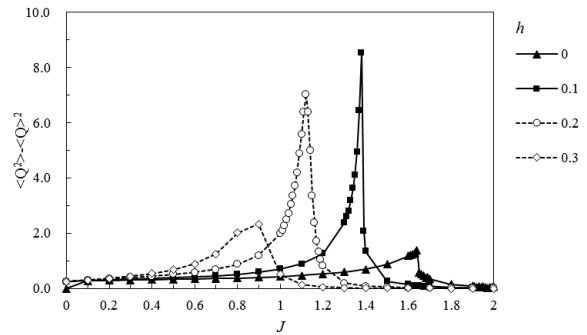


Fig 2. Relationship between $\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$ and J

4. 考察

図 1 において $\langle Q \rangle$ の値に飛びが生じた原因として、ほぼ全てのセルが $Q=1$ となったほうが、 $Q=0$ のセルが残るよりもエントロピーロスを抑えることができるためであると考えられる。図 1 および図 2 について、相分離が見られなくなったところでゆらぎの値にピークが見られることから、この近傍に臨界点が存在すると考えられる。

5. 結言

今後の展望として、枯渇相互作用の影響の受け方に方向性をもたせた場合の凝集挙動について調べていくとともに、枯渇相互作用に加えて巨大分子間に直接相互作用が働いた場合の凝集挙動についても調査を行っていきたいと考えている。

文 献

- 1) Asakura, S. and Oosawa, F.: Interaction between Particles Suspended in Solutions of Macromolecules, *J.Polymer Sci*, **33**, 183, 1958.
- 2) Shimoda, K. and Yamamoto, T.: Effect of Concentration Fluctuation of Solution to Membrane Fluctuations in Multi Lipid-bilayer Membrane System, *AIP Conference Proceedings*, **1518**, 440, 2013.