平行平板間の高分子溶液のモンテカルロシミュレーション

宮下嶺*，山本 隆夫**
* 群馬大学大学院理工学府分子科学部門(物質・生命理工学教育プログラム) 理論物理化学研究室
[〒376-8515　群馬県桐生市天神町 1-5-1 4 号館]
** 群馬大学理工学府理工学基盤部門

１．緒言

生体内では高分子鎖が本来の広がりの程度より狭い領域に閉じ込められることがある．そのような狭い領域に閉じ込められた高分子溶液の性質についてモンテカルロシミュレーションで調べた結果を報告する．狭い領域として間隔 Mz の平行平板間を考える．その平板間に挟まれた高分子溶液中の高分子鎖の広がり具合を，平行平板に垂直な方向の慣性半径 R_z と，Mz および高分子鎖長 L の関係に注目して解析した．この関係を導出する現象論を構築し，シミュレーション結果をこの現象論に基づき解析した．

２．格子模型

モンテカルロシミュレーションは格子模型を用いて行った。x，y 方向の格子点数 M を 300 とし，周期境界条件を課した．x-y 平面に平行な平板の間隔 Mz=6〜70，L=20〜280 とし，体積分率が Φ=1/90 となるよう分子鎖の本数 n を調整した。

j 番目の高分子鎖での s 番目の segment の格子上の位置を，$r_j = (x_j^{(1)}(s), x_j^{(2)}(s), x_j^{(3)}(s))$とする．

Hmailtonian H と計測する慣性半径はそれぞれ

$$H = \varepsilon \sum_{a=1}^{3} \sum_{j=1}^{n} \sum_{s=1}^{L} \left| x_j^{(a)}(s) - x_j^{(a)}(s-1) \right| \quad (1)$$

$$R_z^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{L} \sum_{s=1}^{L} (x_j^{(3)}(s) - x_{j,G}^{(3)})^2 \quad (2)$$

ここで ε は，高分子鎖の曲がりにくさを示す．$x_{j,G}^{(3)}$ は j 番目の高分子鎖の重心の z 座標．ボルツマン定数を k_B として、温度 T は $T = \varepsilon / k_B$，高分子鎖間相互作用として排除体積効果のみを考慮した..

３．シミュレーション結果と考察

一般に R_z^2 は高分子鎖長 L と間隔 M_z の関数，すなわち 2 つの引数を持つ関数 f を用いて $R_z^2 = f(L, M_z)$ で表せることがわかる。

平板間の溶液中の高分子鎖をガウス鎖にその z 座標 $x^{(3)}(s)$ に対して $0 \le x^{(3)}(s) \le M_z$ という条件を課した現象論模型に Self-Consistent Harmonic 近似[1)]を用いて解析を行うと，スケーリング関係

$$R_z^{\ 2} / L = g(M_z^2 / L) \quad (3)$$

が得られる．ここで，g はある関数。このことはシミュレーション結果を，R_z^2/L，M_z^2/L でプロットするとある Universal Curve 上に乗ることを示している．

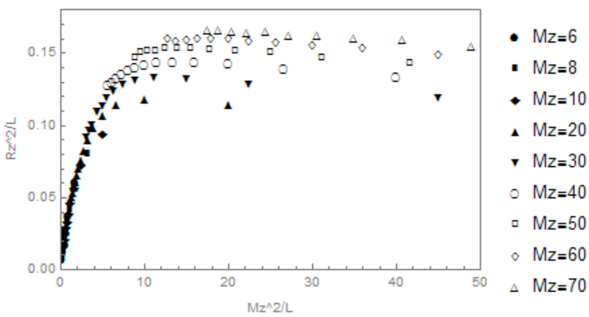

Fig. 1 Relationship between R_z^2/L and M_z^2/L.

データをプロットしたものを図 1 に示す．これより Mz^2/L が十分小さいとき，Universal Curve 上にプロット点が乗るので導出したスケーリング関係式が正しいことが分かる．

４．結言

平行平板中の濃厚高分子鎖溶液の一本の高分子鎖の広がり具合を，格子模型を用いたモンテカルロシミュレーションで調べた．

平行平板に垂直方向(z 軸方向)では，z 軸方向の慣性半径 R_zに制限が加えられる．このため，R_zは L と Mz の関数となる．現象論によりスケーリング関係 $R_z^{\ 2} / L = g(M_z^2 / L)$を導出した。シミュレーション結果を R_z^2/L，M_z^2/L でプロットすると Universal Curve に乗ることより，スケーリング関係が妥当であることを示した．

文　献

1) Nattermann, T.:Domain-walls fluctions and the incommensurate-commensurate transition in 2 and 3 dimensions. Journal de physique, **43**, 631, 1982.