

弾性殻の吸着変形

東京都立大学大学院 理学研究科 田村 啓造、好村 滋行、加藤 直

[はじめに] 近年、グラフアイト膜や固体ラングミュア膜、細胞膜骨格等の弾性薄膜の変形が調べられている。また理論的にも Föppl-von Kármán 方程式による平板の変形のスケーリング解析が行われている [1]。しかし、これらは全て平面の弾性板に対する研究であり、曲がった弾性板、つまり弾性殻についての研究は少ない。弾性殻の性質は平面弾性板のそれとは異なり、曲がるときには面内の伸長を伴う。これに関連して、我々は以前、弾性チューブの吸着変形を計算機による数値解析とスケーリングの議論で研究した [2]。それ以外ではアクチンで覆われたベシクルの安定性も調べられている。巨視的なスケールの実験としては、ピンポン玉、テニスボールの変形についての報告もなされている。本研究では基板吸着による弾性殻の変形において、新たな不安定性があることを数値的な結果及び解析的な考察を含めて議論する。

[モデル] 図1に示すように基板吸着した弾性殻に対するバネ・ビーズモデルを考える。三角形の頂点をビーズ、辺をバネとする。また基板に垂直な方向を z 軸、基板に平行な面を x - y 平面とする。弾性殻においては伸長と曲げを考えなければならない。伸長エネルギーは線形バネの足し合わせと考える。

$$E_s = \sum_n \frac{1}{2} C_s \left(\frac{L_n - L_0}{L_0} \right)^2 \quad (1)$$

ここで C_s はバネ定数、 L_n は n 番目のバネの長さ、 L_0 はバネの自然長である。曲げエネルギーは次式により計算する。

$$E_b = \sum_{\langle \alpha\beta \rangle} \frac{1}{2} C_b |\hat{n}_\alpha - \hat{n}_\beta|^2 \quad (2)$$

ここで C_b は曲げ定数、 $\hat{n}_{\alpha(\beta)}$ は $\alpha(\beta)$ 番目の三角形の単位法線ベクトルで、和はすべての隣り合う三角形の組について行う。

吸着のエネルギーは次のものを考える。

$$W = \sum_i \frac{2^{8/3}}{3} \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{z_i} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{z_i} \right)^3 \right] \quad (3)$$

ここで z_i は i 番目のビーズと基板間の距離である。このポテンシャルは $z_i = 2^{2/9} \sigma$ のときに最小値 $-\epsilon$ をとる。上式の第一項は基板とビーズ間の排除体積相互作用を表している。第二項はファン・デル・ワールス (vdW) 相互作用を表しており、ビーズと基板原子間の vdW 相互作用を足し合わ

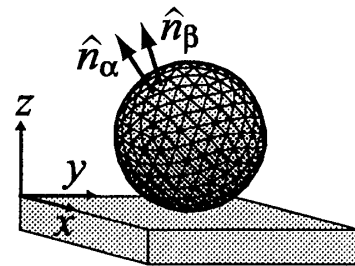


図1: 基板吸着を表すバネ・ビーズモデル。 $\hat{n}_{\alpha(\beta)}$ は $\alpha(\beta)$ 番目の三角形の単位法線ベクトル。

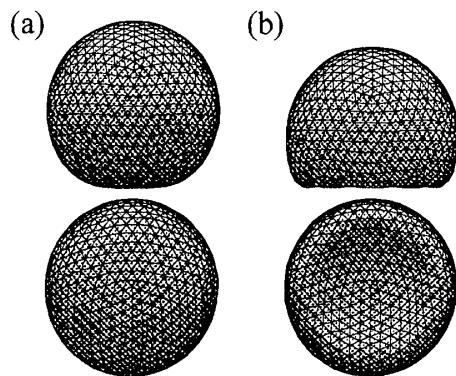


図 2: 計算結果の一例。($C_s/\epsilon, C_b/\epsilon$) はそれぞれ、(a) (150, 9)、(b) (150, 2)。横から見た図と底面の図をそれぞれ上下に並べて描いた。

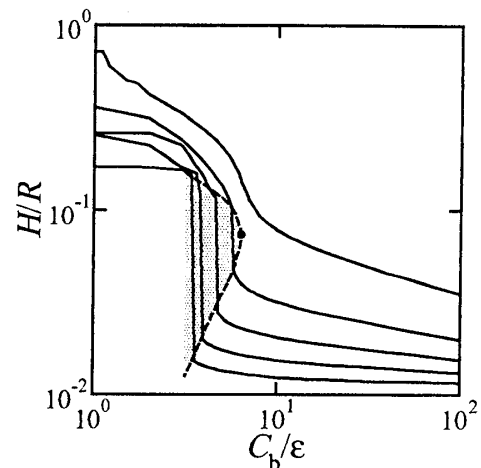


図 3: 無次元化した相対的へこみ長 H/R を C_b/ϵ の関数としてプロットしたもの。それぞれの曲線は上から C_s/ϵ の値が 100 から 900 まで 200 毎のものである。

せた結果、距離の 3 乗に逆比例するエネルギーが導かれる。全エネルギー $E_{\text{tot}} = E_s + E_b + W$ を共役勾配法を用いて最小化することにより、平衡状態の弾性殻の形状を求めた。無次元パラメータは $C_s/\epsilon, C_b/\epsilon, L_0/\sigma$ の 3 つである。計算結果は $L_0/\sigma \approx 0.1$ としており、ビーズの数は $N = 812$ の場合を示している。

[結果] 図 2 は計算結果の例である。 $C_s/\epsilon, C_b/\epsilon$ とともに十分に大きいときにはほとんど変形を受けない。 $C_s/\epsilon, C_b/\epsilon$ が小さくなると、(a) のように弾性殻の下部にディスクが形成される。さらに C_b/ϵ を小さくすると、(b) のように弾性殻の下部が殻の内側に入り座屈が起こる。

変形の定量的な解析としてへこみ長 H を測った。弾性殻の半径で無次元化した H/R を C_b/ϵ の関数としてプロットしたものが図 3 である。 C_s/ϵ が大きいときは H/R が不連続的な変化をしており、このときに座屈が起こっている。この不連続性は C_s/ϵ の減少とともに小さくなり、 $C_s/\epsilon \approx 210$ のときに消失する。図 3 の黒丸は不連続性が消失する点で、 $(C_b/\epsilon, H/R) \approx (6.1, 0.09)$ で与えられる。さらに小さい C_s/ϵ の場合の曲線は連続的になり、このときには連続的な座屈が起こっている。

スケーリングの議論から「臨界点」近傍の変形を考察すると [3]、 $H > (C_b L_0^2 / C_s)^{1/2} \sim h$ のとき、即ちへこみ長 H が殻の実効的な厚さ h よりも大きくなったときに座屈が起こることが予想される。図 3 の「臨界点」における弾性定数の値をこの結果に適用すると $H/R \approx 0.079$ となる。これは数値計算で得られた「臨界値」 $H/R \approx 0.09$ に非常に近い。

参考文献

- [1] A. E. Lobkovsky, Phys. Rev. E **53**, 3750 (1996).
- [2] S. Komura, K. Tamura and T. Kato, Eur. Phys. J. E **13**, 73 (2004).
- [3] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Pergamon, Oxford, 1986).