

よって開発された DADAS 法¹⁾である。日本では、ペプチドと呼ばれる小さな蛋白質の NMR 実験、及び立体構造計算は既にいくつか報告されている。しかし、蛋白質について ¹H-NMR の実験をしている研究者は少ない。増して、蛋白質の立体構造が再現できる程の詳細かつ高精度の実験はほとんどなされていない。我々の研究室と東京都臨床医学研究所の神田、稲垣両博士との共同研究によって、日本で初めて NMR のデータから溶液中の EGF (53 残基) の立体構造を決定するというプロジェクトが持ち上がった。我々の研究室では、DADAS 法の計算手順の確立はされていないのに加えて、生の NMR のデータから蛋白質の立体構造を決定した経験はなかった。丁度、Wagner らによって BPTI (58 残基) の溶液中の立体構造決定に関する論文が発表された²⁾この計算は DADAS 法ともう一つ別の方法の二つの方法でなされた(この DADAS 法のプログラムは、現在日本にあるものとは若干異なるものである)。BPTI は詳細で高精度の NMR 実験がなされ、立体構造計算のためのデータも十分吟味されている。そこで、論文中の生の NMR のデータを用いて、DADAS 法の従来の計算手順の改良を行った。これは、EGF の立体構造決定にも効果を発揮した³⁾

この論文には、BPTI の立体構造計算の従来の手順と、改良された手順の結果を示した。また、改良された手順によって神経毒ペプチド Conotoxin GI の立体構造を計算した。1985 年に DADAS 法によって Conotoxin GI の溶液中の立体構造は決定されているが⁴⁾その時には報告されなかった興味深い結果が得られたのでそれを報告する。

4. 長距離拡散による相分離

興 梶 光 治

秩序化過程の理解は非平衡統計力学の重要な課題である。これまでに秩序化過程に対する多くの理論による研究、実験による研究、計算機実験による研究がなされてきた。熔融状態の 2 種の高分子からなる系(以下ポリマーブレンドという)でも秩序化過程が観察されるが高分子には動的性質において他の系では見られない特徴があるため秩序化過程に限らず高分子からなる系の動力学は研究対象として興味深いものである。本論では熔融状態のポリマーブレンドの秩序化過程に対するコンピュータ・シミュレーションに適したモデルを提案する。

まず § 2 において秩序化過程に対する研究を簡単に紹介し、特に後期過程が興味ある研究対

象であることを述べる。§ 3 では高分子溶融体の特殊な動的性質を述べ、鎖状高分子の溶融体の動的過程に対するレプテーション・モデルを紹介する。§ 4 ではレプテーション・モデルにより高分子溶融体の秩序化過程の後期過程での界面の運動を考察する。§ 5 では秩序化過程のコンピュータ・シミュレーションに適するモデルである Oono-Puri による cell-dynamical System を紹介する。§ 6 では Oono-Puri のモデルをもとにしたポリマーブレンドの特徴をとり入れたモデルを提案し、そのコンピュータ・シミュレーションによる結果を述べる。

5. トリクリティカル系の秩序化過程

佐 藤 昭 典

2 元合金における相分離はよく知られている。ここでは、高温で一様な状態から急冷した時に、一様な相が不安定になり、濃度の違う 2 相が安定になり、その 2 つの相が、空間で発達してゆく過程を秩序化過程と呼ぶ。秩序化過程では、保存量である濃度の他に、非保存量の秩序度があり、それぞれ異なった秩序化を示す。一般に、濃度の秩序化過程を相分離、秩序度のそれを規則化と呼ぶ。規則化に伴って、相分離が同時進行する例が、Fe Al 合金等に見られる⁽¹⁾。トリクリティカル系は、そのような例で見られるように、3 つの相が共存できる系といえる。

トリクリティカル系に限らず、秩序化過程にみられる濃度や秩序度の空間発展のシミュレーションとしては、イジングモデルのモンテカルロ法が、ダイナミクスを含む方法として、研究されてきた⁽²⁾。それに対して、大野-Puri によって CDS (Cell Dynamical System) が提案された⁽³⁾。この方法は、秩序化過程における濃度等の成長を、うまく表現しているように見える。しかし、そこで使われるパラメターを、現実の物理量に対応させることは、イジングモデルに比して、困難である。

ここでは、大野-Puri の方法を、トリクリティカル系の秩序化過程に適用し、その濃度と秩序度のつくり出すパターン成長を調べる。