

高分子からみあい系の新規高速分子シミュレーション手法

名古屋大院工 増渕雄一

Univ. Naples, G. Marrucci, G. Ianniruberto

CNR, Italy, F. Greco

mas@stat.cse.nagoya-u.ac.jp

はじめに

多数の高分子がからみあった系は、1)分子量が数万から数百万に及ぶこと、2)数百から数千秒以上の時間スケールを持つスローダイナミクス)が重要であること、から既存の分子シミュレーションで扱うのが非常に困難である。筆者らはレプテーション理論に基づく粗視化を行いながらも、既存の分子シミュレーションと同様に分子の形や相互作用を様々に取り入れることができる新しい手法を開発した。

モデル

高分子をからみあい点間分子量程度の要素(チューブ要素)に分割する[1,2]。分割点がからみあい点であり、そこでは他の分子とからみあいを形成する。からみあいは、スリップリングとよばれる束縛に置き換える(高分子はレプテーション運動によってのみからみあいをはずすことができると仮定する)。高分子の運動は、このスリップリングの運動と、チューブ内部のモノマーの輸送により記述されるとする。まずスリップリングの運動方程式は

$$\zeta \dot{\mathbf{R}}_i = \frac{3kT}{b^2} \sum_j \frac{\mathbf{r}_j}{n_i} - kT \nabla \ln N + \mathbf{f}_i \quad (1)$$

ここで ζ はチューブ要素あたりの抵抗、 \mathbf{R} はスリップリングの位置、 b はチューブ内のモノマーの長さ、 \mathbf{r} はチューブ要素ベクトル、 n はチューブ要素内に含まれるモノマーの数、 N は単位体積あたりのチューブセグメントの数である。右辺第1項がからみあいにかかる張力のバランス、力学平衡を現し、第2項は力学平衡に起因するネットワークの変形に伴う浸透圧である。第3項はランダム力である。チューブの中のモノマーの運動は以下の式で計算する。

$$\frac{\zeta}{2} \frac{n_0}{a} \dot{n}_i = \frac{3kT}{b^2} \left(\frac{r_{i+1}}{n_{i+1}} - \frac{r_i}{n_i} \right) + f_i \quad (2)$$

a はチューブ要素の平衡長さである。右辺第1項は局所的な張力差をあらわし、2項目はランダム力である。からみあいたポロジの組み替えは、逐次末端チューブセグメントに存在するモノマー数 n_i を監視し、ある数より少なくなったらからみあいの消滅、逆に多くなれば周りの分子からランダムに選んだ相手とからみあいの生成を行う。

計算例

計算のスナップショットを示す。分子を構成する質点(スリップリング)の数は約60、相当する分子量はポリスチレン換算で約50万である。ボックス状に描かれているユニットセル中に、この分子が75個存在する。(図では見やすさのためにそのうちの一分子だけを強調して表示してある。)このような系でもパソコン程度の計算資源で十分計算が可能である。計算結果の実験との比較については当日紹介する。

謝辞

本研究は平成13年度NEDO産業技術研究助成事業の援助を受けています。

参考文献

- [1] Y. Masubuchi et al; J. Chem. Phys., 115, 4387 (2001).
[2] Y. Masubuchi et al; Proc. ICAPP2001, submitted

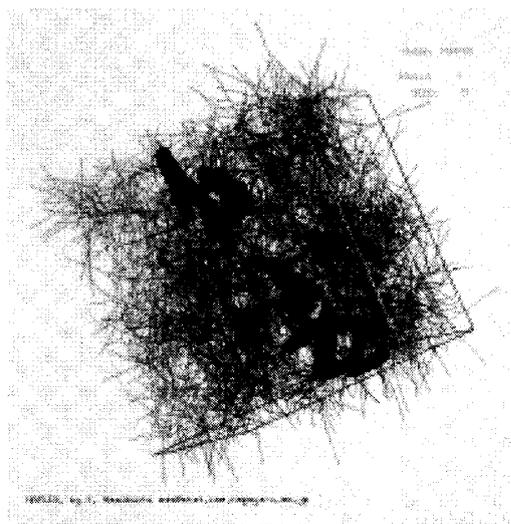


Figure A typical snapshot