

# 表面張力を持たない膜モデルの モンテカルロシミュレーション

茨城高専 鯉淵 弘資<sup>1</sup>, 草野 宣幸, 仁平 敦士, 鈴木 孔明

脂質分子膜のモデルとして表面張力と曲げ剛性を持つ膜モデルは Helfrich の Hamiltonian によって定義される。このような（ただし自己交叉は許される）分子膜モデルには、分子の流動性がある場合も、それが無い場合と同じように、形状変動の 2 次相転移があり得る [1]。それは、臨界点において曲げエネルギー (bending energy) の揺らぎとしての比熱が発散することで特徴付けられる相転移である。一方、表面張力がないとしたモデルは、分子の流動性がない場合には 2 次の相転移を持つことは、すでに Kantor や Nelson, その他多くの研究によって明らかにされている。

しかし、表面張力を持たないモデルにおいて、この比熱の発散が分子の流動性がある場合も見られるかどうかは数値計算的にも未確認である。そこで、筆者らはハミルトニアンとして曲げエネルギーと剛体壁ポテンシャルを持つモデルに対して、MC 法によって流動性がある場合とない場合で、形状変動の相転移に関して研究した [2]。まとめると次のようになる。

1. 曲げエネルギーと（ボン드로結ばれた 2 分子間の）剛体壁ポテンシャルからなるハミルトニアンで定義される膜モデルにおける形状変動の相転移を MC 法で調べた。球面の位相を持つ 3 角形分割されたメッシュを用いた。
2. メッシュ構造が固定されて分子運動が局所的にのみ可能であるように限定された膜 (crystalline surfaces) の場合、膜は（既に知られているように）曲げエネルギーの揺らぎとしての比熱が発散することで特徴付けられる形状変動の 2 次相転移を起こす。
3. その場合、膜は臨界点でも平滑相（ただし臨界点から極端には離れていない場所）でも、近くで見ると乱雑で遠くから見ると滑らかである。
4. この膜モデルは動的 3 角形分割の手法で分子に流動性を持たせるとその 2 次相転移が消え、その結果、曲げ剛性が極端に大きくない限り膜は乱雑な状態のままである。

## 参考文献

- [1] H.Koibuchi, Phys. Lett. **A300**, 586 (2002).
- [2] H.Koibuchi, N.Kusano, A.Nidaira, K.Suzuki, and T.Suzuki, Phys. Lett. **A314**, 1 (2003).

---

<sup>1</sup>E-mail: koibuchi@mech.ibaraki-ct.ac.jp