

伸張された半屈曲鎖の準静的な緩和時における凝縮転移の理論

(京大理) 平岩徹也、太田隆夫

【はじめに】

近年の実験技術の進歩により、高分子一本鎖の伸張や形態転移の精密な実験が可能になってきた。我々はこのような高分子一本鎖の伸張の実験に対応する理論として、Hallatschekらによる十分伸びきりに近い条件下において線張力の伝播を考慮する方法[1]に基づいて、高分子一本鎖の動的な力学応答について研究している[2]。この理論は、wormlike-chain モデルを用いて高分子鎖の曲げ弾性と伸びきりの効果を考慮に入れている。

この方法をセグメント間に引力を持つモデルに拡張すると、線張力の一様化に向かう寄与と引力による非一様化を促進する寄与の拮抗により、伸長外力を準静的に弱めていく過程において鎖全体で線張力一様な状態が不安定化することがわかった。これは Murayama らの実験[3]に見られるような、伸張された半屈曲鎖の緩和時の凝縮状態への転移に対応するのではないかと考えている。

【結果と考察】

我々は通常の wormlike-chain モデルの有効エネルギーの代わりに、セグメント間の距離に依存する引力相互作用を加えた有効エネルギー

$$H = \frac{\kappa}{2} \int_0^L ds \left| \frac{d^2 \mathbf{r}}{ds^2}(s, t) \right|^2 + \frac{1}{2} \int_0^L ds \int_0^L ds' V(|\mathbf{r}(s, t) - \mathbf{r}(s', t)|^2)$$

を用いたモデルを元に計算を進めた。ここで κ は鎖の剛直性、 L は全長、 $\mathbf{r}(s, t)$ は鎖上の位置 s のセグメントの時刻 t における適当な原点からの位置ベクトルである。 V は距離の2乗に依存する引力相互作用であり、全長 L に対して十分に短距離相互作用であると仮定する。

Hallatschek らの方法と同様に、伸びきりに近い状況を考えて、断熱近似と局所平衡近似を用いることで、位置 s における鎖のたわみの程度を表す量 $\langle \bar{\rho} \rangle(s, t)$ と線張力 $f(s, t)$ の時間発展方程式

$$\zeta_{\parallel} \partial_t \langle \bar{\rho} \rangle(s, t) = -\partial_s^2 f(s, t) - \int_0^{+\infty} dz 2z \frac{\partial V}{\partial u} \Big|_{u=z^2} \{ \partial_s \langle \bar{\rho} \rangle(s+z, t) - \partial_s \langle \bar{\rho} \rangle(s-z, t) \}$$

が導出できた。 ζ_{\parallel} は鎖のセグメントに平行な向きでの摩擦係数を表す。これに加えて、線張力 $f(s, t)$ に対して $\langle \bar{\rho} \rangle(s, t)$ を与える式も導かれ、これら2式の閉じた方程式系となっている。外力は線張力に対するディリクレ型の境界条件として与えられる。右辺第1項が線張力の一様化の効果、第2項が引力の効果を表す形になっている。

この方程式系は線張力とたわみが鎖全体で一様な状態を定常解として持つ。この一様定常解の周りでの線形安定性解析を行ったところ、臨界的な伸長外力が存在して、それより強く伸張している場合は一様状態が線形安定であり、弱い場合は線形不安定となることがわかった。従って、強く伸張した状態から準静的に緩和させていくと、臨界的な外力において転移が起こることが予想される。さらに、鎖の中心付近ほど強くたわみ始めることもわかった。

まだ問題点も残されており詳細は当日議論するが、これは Murayama らの実験[3]などに見られる伸張された半屈曲鎖の緩和時の凝縮転移の開始を説明する理論と成り得るのではないかと考えている。実験結果との比較により、理論の検証をしていきたい。

【参考文献】

- [1] O. Hallatschek, E. Frey, and K. Kroy, Phys.Rev.E **75**, 031905(2007).
- [2] T.Hiraiwa and T.Ohta, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 023001 (2008).
- [3] Y. Murayama, H. Wada, R. Ishida and M. Sano, Prog. Theore. Phys. Supp. **165**, 144 (2006).