

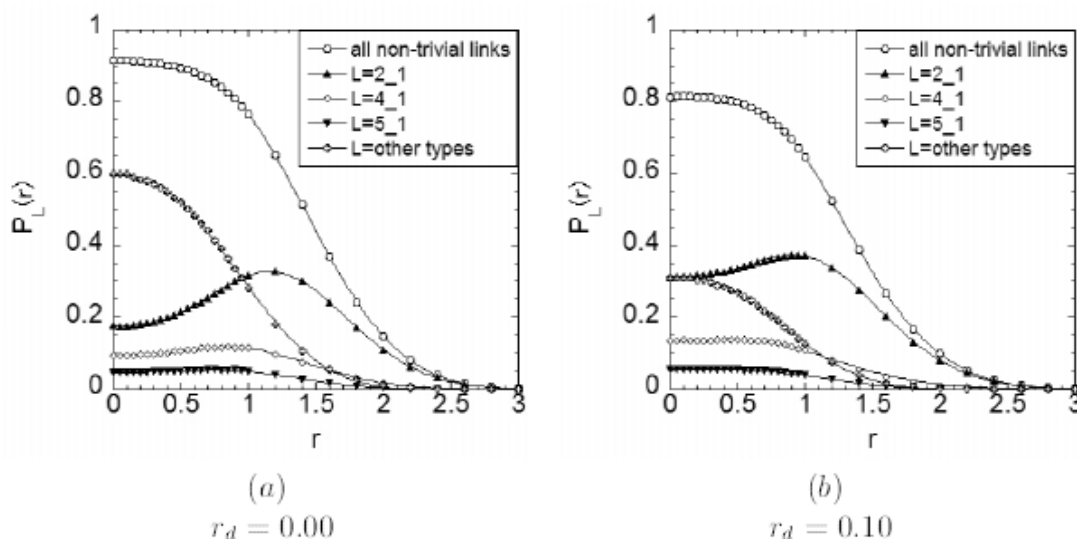
結び目高分子のダイナミクスと高分子ネットワーク：マイクロなトポロジーからマクロへ

お茶の水女子大学・教授 出口 哲生

マイクロなトポロジーからマクロを解明する以下の研究を行った。(1) 二本の排除体積環状鎖が絡み目を生成する確率の数値計算とその適合関数の導出、(2) 溶液中の結び目環状高分子のダイナミクスのブラウン動力学による解析、(3) 結び目環状高分子溶液の固有粘度のブラウン動力学による計算、の三つである。絡み目生成確率は環状高分子溶液の浸透圧で実測される。(2) で求められた結び目高分子の慣性半径と流体力学的半径の比は、実験と整合的であった。

1. 環状の自己排除体積鎖の絡み目生成確率 [1]

2個の自己排除体積鎖 (Self-Avoiding Polygons, SAP) を重心間の距離 R の位置にランダムに生成したとき、絡み目 L を生じる確率 $P_L(r)$ をシミュレーションで求めた。SAP の各頂点に半径 r_d の剛体球が置かれ、剛体球同士の重なり合いは禁止される。変数 r は SAP の慣性半径 R_g を用いて規格化された距離 $r=R/R_g$ を表す。2個の SAP のトポロジーを絡み目不変量で判定して確率 $P_L(r)$ を求めた。距離 r の依存性を表す関数形として、カイ自乗検定で有効なものが今回はじめて求められた。その適合曲線は排除体積変数 (半径 r_d) の値に依らず良く適合した (下図参照) [1]。興味深いことに、半径 $r_d=0.2$ の場合、絡み目生成確率 $P_L(r)$ は SAP のセグメント数 N に依存しないことが見出された。



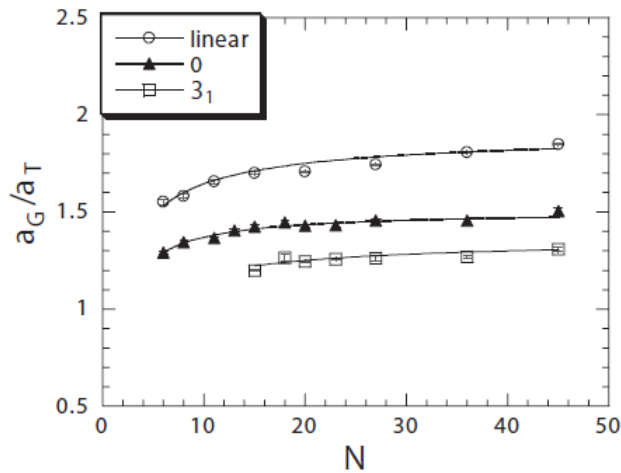
2. 結び目環状高分子の拡散定数と理想結び目 [2,3]

結び目をつくる環状高分子の拡散定数を、流体力学的相互作用を取り入れたブラウン動力学シミュレーションで求めた。セグメント間のボンドがすり抜けしないように、FENE ポテンシャルとレナード・ジョーンズポテンシャルを設定した。

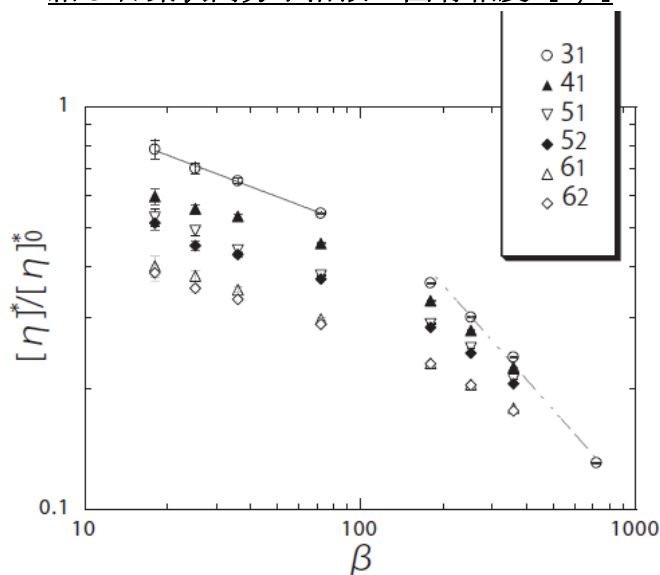
結び目高分子の拡散定数とこれと同じセグメント数 N を持つ線形高分子の拡散定数の比は、 N にほとんど依存せずほぼ一定値であった。結び目の拡散定数は、理想結び目 (ideal knots) の平均交点数 (average crossing number, N_{Ac}) の線形関数で表されることが分かった。

慣性半径 a_g と流体力学的半径 a_T の比をブラウン動力学で求めた。臨界現象における繰り込

み群の立場では比 a_G/a_T は普遍振幅比に相当する。比 a_G/a_T は N に弱くしか依存せず、 N が大きい場合には一定値に近づく（上図参照）。比の値は名大松下研の実験とも整合的である。



3. 結び目環状高分子溶液の固有粘度 [4,5]



結び目の環状高分子溶液の固有粘度 $[\eta]^*$ を流体力学的相互作用下のブラウン動力学で求めた。ボンド間のすり抜けは禁止されている。

結び目高分子の場合にも、低シア領域から高シア領域へのクロスオーバーが見られた。そして、結び目環状高分子溶液の固有粘度は、結び目に対する理想結び目の平均交点数 N_{AC} の2次関数として表された。左図で β と $[\eta]^*_0$ は無次元化されたシア率とゼロずり粘度を表す。

<参考文献>

- [1] N. Hirayama, K. Tsurusaki and T. Deguchi, Linking probabilities of off-lattice self-avoiding polygons and the effects of excluded volume, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009) 105001.
- [2] N. Kanaeda and T. Deguchi, Diffusion of a ring polymer in good solution via the Brownian dynamics, J. Phys. A: Math. Theor. **41** (2008) 145004 (11pp) arXiv:0708.1397
- [3] N. Kanaeda and T. Deguchi, Universality in the diffusion of knots, to appear in Phys. Rev. E (2009), arXiv:0807.0304 (cond-mat.soft).
- [4] N. Kanaeda and T. Deguchi, Intrinsic viscosity of knots in solution evaluated through the Brownian dynamics, to appear in the proceedings of the workshop "Knots and soft-matter physics", Aug. 26-29, 2008, YITP, Kyoto Univ., Kyoto, Japan
- [5] N. Kanaeda and T. Deguchi, in preparation.