

論文要旨

Knot probabilities and scaling exponents of ring polymer chains: effects of topology and excluded volume

(環状高分子の結び目確率とスケーリング指数におけるトポロジーと排除体積の効果)

上原恵理香

3次元空間中の自分自身と絡まりあう閉曲線を結び目という。環状高分子においても結び目が生じることが、環状ポリスチレンや原始的生物に見られる環状 DNA を用いた実験により確認されている。結び目が出来ることで環状高分子の性質がどのように変化するのか、またはそもそもどの結び目がどれほどの割合で環状高分子に生じているのかを考察することは興味深い問題である。本研究は、円筒型の排除体積を持つ等辺ランダム多角形をモンテカルロ法により生成し、結び目の生じる確率と慣性半径を統計的に解析することで、結び目環状高分子の物性を数値計算の手法から明らかにすることを目指すものである。ランダム多角形は環状高分子のモデルのひとつで、円筒型の排除体積は溶液中の DNA に働く対イオンの遮蔽効果を近似している。円筒の半径を変更し、さまざまな塩濃度の溶液中における環状 DNA の性質を議論する。

結び目確率の研究

環状高分子に結び目の生じる割合をランダム多角形の結び目確率から推測する。ランダム多角形の頂点数 N は環状高分子のモノマー数に比例し、環状 DNA の場合には 100 塩基対分の長さがランダム多角形の 1 つの辺に対応すると考えられている。本研究においては、ランダム多角形の結び目確率を以下の式で近似し、係数 C_K と特性長 N_K と指数 $m(K)$ を未知変数として当てはめた。

$$P(N; r, K) = C_K x^{m(K)-1/2-x} \Gamma(x + 1),$$
$$x = \frac{N}{N_K}.$$

ここで、 r は円筒の半径、 K は結び目型を表す。

この式は、 N が特性長 N_K より長い範囲でよく結び目確率に当てはまる。特性長 N_K は結び目の種類によらずほぼ一定で、円筒の半径について指数関数的に増大する。また、指数 $m(K)$ は、素な結び目の場合には 1、複合結び目の場合には複合結び目中の素な結び目の数に近い値となる。

素な結び目の結び目確率については、結び目型によって変わるパラメータは係数 C_K のみ、円筒の半径によって係数 C_K と特性長 N_K が変化する。これにより素な結び目の結び目確率については、縦軸を係数 C_K 、横軸を特性長 N_K によって規格化することで、異なる結び目型や異なる円筒半径のランダム多角形に対して、その結び目確率を重ね合わせることが出来ることを本研究で見出した。

慣性半径の研究

高分子の慣性半径は $\langle R_g^2 \rangle \propto N^{2\nu}$ のスケーリング則に従う。 ν はスケーリング指数で、 Θ 溶媒中の環状高分子で 0.5、良溶媒中の環状高分子で 0.59 になる。ここでいう環状高分子は、さまざまな結び目型の環状高分子の混合した、トポロジカルな制限の無い環状高分子の試料である。一定の結び目型を持つ環状高分子だけを取り出して慣性半径を測定した場合、その値は結び目型によって異なることが予想される。自明な結び目が最も大きく、 3_1 結び目が次に大きい慣性半径を持つであろう。複雑な結び目の慣性半径は小さくなるはずだ。スケーリング指数については、結び目型を一定に制限することで増加するという見方と不変という見方が存在する。結び目判定をしたランダム多角形の慣性半径を解析し、スケーリング指数の近似値を評価した。

【参考論文】

[1] Erica Uehara and Tetsuo Deguchi, J. Phys. A: Math. Theor. **46** (2013) 345001

“Exponents of intrachain correlation for self-avoiding walks and knotted self-avoiding polygons”

[2] Erica Uehara and Tetsuo Deguchi, J. Chem. Phys. **140** (2014) 044902

“Statistical and hydrodynamic properties of double-ring polymers with a fixed linking number between twin rings”

[3] Erica Uehara, Ryota Tanaka, Mizue Inoue, Fukiko Hirose, Tetsuo Deguchi, Reactive and Functional Polymers **80**, 48-56 (2014)

“Statistical and hydrodynamic properties of double-ring polymers with a fixed linking number between twin rings”