

学位論文内容の要旨

学位申請者	上原 恵理香 【理学専攻 平成24年度生】	要 旨
論文題目	Knot probabilities and scaling exponents: 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)	<p>ゴムや生体物質など身近な様々な物質の中には高分子で形作られるものが多い。従来は、理論的に取り扱う高分子の構造は、合成が容易な線形鎖に限定されていた。しかし、自然界には大腸菌のプラスミドの環状DNAなど、環状に閉じた高分子鎖が存在する。さらに最近の合成化学の進歩によって、重合度が大きく分散が小さく高純度の環状高分子溶液が実現された。さらに、トポロジー的に複雑な構造をもつ高分子鎖が合成された。このため、高分子のトポロジー効果に対する系統的理解が必要となった。環状鎖のトポロジーは結び目で表される。</p> <p>高分子鎖の自己排除体積効果はモノマー間に非自明な長距離相互作用を導き、理論解析は一般に困難である。そこで、自己排除体積鎖(Self-Avoiding Walks, SAW)の模型を用いて数値シミュレーションで調べる。70年代に de Gennes による繰り込み群の導入以降、高分子の物理量の重合度依存性におけるスケーリング的振る舞いは、スケーリング指数で特徴付けられる。</p> <p>本研究では、環状高分子鎖の理論模型として自己排除体積鎖(Self-Avoiding Polygons, SAP)を考える。特に、長さ一定の円筒が連なった円筒鎖SAPを用いた。半径はDNAのまわりの電荷の遮蔽長に対応し、対イオン濃度が高いと、負に帯電するDNAのまわりの電荷遮蔽長が短くなり、小さい半径に対応する。</p> <p>ランダムに環状鎖(SAP)を生成した場合、与えられた結び目をもつ環状鎖(SAP)が出現する確率を、結び目確率とよぶ。本研究では円筒SAPにおける結び目確率を数値シミュレーションで求めた。そして、自明な結び目や三葉結び目など、与えられた結び目のトポロジーを持つSAPを多数生成し、その統計的平均を計算して、結び目確率や慣性半径などを数値的に求めた。円筒SAPの結び目確率は、電解質溶液中の環状DNAの実験で測定されている。</p> <p>申請者はSAPを効率よく生成する方法を工夫し、従来よりも長い円筒SAPを多数生成し、結び目確率を高精度で求めた。その結果、結び目確率の頂点数依存性はSAPの頂点数Nに関する漸近展開で十分に良く表され、結び目に依存する部分としない部分が明らかにされた。そして円筒半径を変化させて電解質濃度依存性を調べた。さらに、与えられた結び目を持つ円筒SAPの慣性半径を、円筒半径を変化させて求め、トポロジー効果を明らかにした。</p>
審査委員	(主査) 教授 奥村 剛	
	教授 出口 哲生	
	教授 小林 功佳	
	教授 浜谷 望	
	准教授 北島 佐知子	