

○山田祐理、片岡洋右  
(法政工)

*Polyampholyte* (PA)は、電荷を持ったモノマーが直鎖状に結合した分子である。その直鎖分子の電荷配列がちょうど半分ずつに分かれ、それぞれ同じ絶対値の正電荷/負電荷となっているものを **di-block PA** と呼ぶ。我々はこの **di-block PA** について、レプリカ交換モンテカルロ法を用いて畳み込みシミュレーションを行った。

### モデルと計算概要

モノマー数  $N$  個の **di-block PA** は、片側の  $N/2$  個のモノマーは正の、残り  $N/2$  個のモノマーは負の電荷を持つ。分子内ポテンシャルは、各モノマー間の静電ポテンシャル、隣接モノマー間の弾性ポテンシャル、隣接していないモノマー間のソフトコアポテンシャルの和として与えた：

$$\phi = \sum_i \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_i \frac{k}{n} (r_{i,i+1} - r_e)^n + \sum_i \sum_{j>i+1} 4\epsilon \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12}. \quad (1)$$

$q_i$  は第  $i$  モノマーの電荷、 $\epsilon_0$  は真空の誘電率、 $r_{ij}$  は  $i$ - $j$  モノマー間の距離、 $n$  と  $k$  は弾性パラメータ、 $r_e$  は隣接モノマー間の平衡距離、 $\epsilon$  と  $\sigma$  はソフトコアパラメータである。モノマー数  $N$  は 20、40、60 および 80 で計算した。

### 計算結果

図は低温での最終スナップショット ( $N = 60$ ) の例である。この系の最安定構造は、二重螺旋状に伸びた構造であると予測できた。一方、局所解に捉えられてしまった例も見られ、それらは綺麗な二重螺旋ではなく球に近く丸まった螺旋構造であった。乱数発生の初期値を変えて複数の計算をした結果、このモデルにおいては、**RE** は **SA** と較べて確かに最安定構造(二重螺旋)を得られる確率が高いものの、その優位性はそれほどはっきりしたものではなかった。しかし、既に多くの報告がなされているように、**RE** が複雑な系の最安定構造を得るのに非常に有効であるのは確かである。今回、**di-block PA** について **RE** の有効性が顕著でなかったのはポテンシャル関数の設定に原因があると思われるが、結果として図のような二重螺旋構造が得られたことは興味深い。

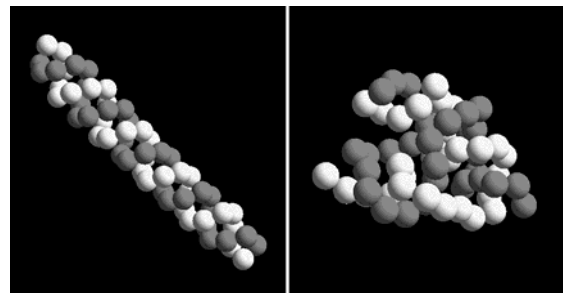


図. 計算結果のスナップショット。最安定構造と期待できる構造として、直線状の二重螺旋構造が得られた(左)。いっぽう、球状に丸まった構造(右)は、局所解に捉えられたものであり、図に挙げた他にも様々な球状構造(局所解)が得られた。

今回の結果から、**di-block PA** の場合、**RE** が最安定構造を得るのに非常に有効であることは確かである。今回、**di-block PA** について **RE** の有効性が顕著でなかったのはポテンシャル関数の設定に原因があると思われるが、結果として図のような二重螺旋構造が得られたことは興味深い。