

○山田 祐理、片岡 洋右

法政大学工学部(〒184-8581 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

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。この 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い、最安定構造がモノマー数や電荷配列によってどう変わるかを調べた。

【モデル】

分子内相互作用は、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。 N 個のモノマーからなる分子の電荷配列は次の通りである。

- (1) 前半 $N/2$ 個が正、後半 $N/2$ 個が負 (di-block PA、図 1)
- (2) 両端 $N/4$ 個ずつ(計 $N/2$ 個)が正、真ん中部分 $N/2$ 個が負
- (3) すべて電荷なし

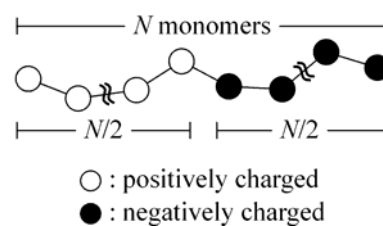


図 1. di-block PA 模式図。

モノマー数は、(1)に関しては $20 \leq N \leq 80$ 、(2)と(3)は $N = 60$ で計算した。

【計算結果】

- (1)の di-block PA に関して、計算終了時のスナップショット例($N = 70$)を図 2 に示す。

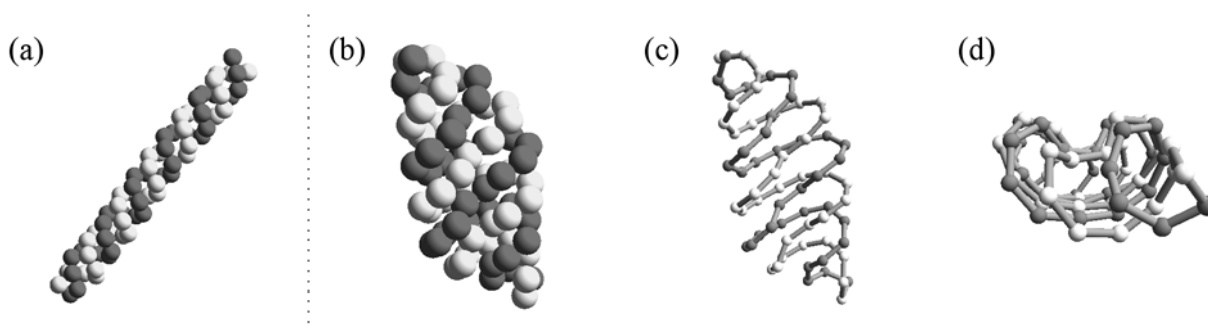


図 2. 計算終了時スナップショットの例($N = 70$)。 (a)二重螺旋、(b)扁平な螺旋。 (c)(d)は、(b)の骨格を違う角度から見たもの。 (d)より、扁平な部分の真ん中が凹んでおり、(b)は二重螺旋が二本並列したような構造をしていることが分かる。

さまざまな N に関して複数回の計算を行った結果、 $58 \leq N \leq 70$ の領域で、(a)と(b)の二種類の整った構造が得られた(そのほか、乱雑に丸まった形も得られた)。相互作用エネルギーの点から最安定構造を検討すると、モノマー数が小さい領域($N < 68$)では、(a)の二重螺旋が最安定であり、それを超えるモノマー数($N = 70$)においては(b)の形が最安定となる傾向が見える。

図 2 以外に得られた構造、および電荷配列を変えた場合については、当日会場にて示す。