

高分子のからみあいダイナミクスの多体モデル

(名大 NCC) 増淵雄一

【緒言】

からみあった高分子の運動の記述はいわゆる管模型が成功しているが、扱える系にはモデル状の制約がある[1,2]. 管模型とは高分子間のからみあいの効果を管状の動的な束縛として表現するモデルで、複雑な多体問題を管内でブラウン運動する高分子鎖1本の問題に置き換える. 管模型に全長揺らぎや束縛解放などのダイナミクスを追加した拡張模型群はからみあった高分子の運動をおおむね再現する. しかし系の単純化, 特に多体問題を1本鎖問題にしたために, 分子間相互作用や分子運動の相関を扱うことはできない.

一方, 計算技術の発展により分子シミュレーションも活用の幅を広げているが, 高分子への適用は未だ困難がある. 高分子の運動の時間スケールは温度や分子量によるが数秒から数千秒あるいはそれ以上にも及ぶ. これは分子シミュレーションで通常議論されるナノ秒に比べてあまりにも長い.

本研究では高分子の多体運動を扱いながらも高速な計算手法を開発している.

【モデル】

今までに2つのモデルを提案してきている.

一つは Primitive Chain Network(PCN)モデル[3]と呼ばれるもので, 高分子液体中のからみあい点の運動だけに注目したモデルである. Kremer-Grest のバネ-ビーズ模型(KG)によるシミュレーションに対して数万倍以上の計算効率でからみあった高分子の運動を計算できる. また多数の分子の運動を同時に解くため, 多様な構造を持つ分子の混ぜ物を解くことができる. しかし注目している系の自由度が“からみあい点”であるため, 異なる化学的構造をもつ物質間の相互作用の取り扱いに難がある.

もう一つのモデルは Multi-Chain Slip-Spring(MCSS)モデル[4]と呼ばれるもので, Rouse 鎖の記述からスタートしてからみあいの効果を仮想バネで表したものである. このモデルは PCN に比べると 100 倍程度遅いが, それでも KG よりは数百倍速い. また系の自由エネルギーが定義されるので相互作用の取り入れは容易である. DPD 法との相性もよい[5].

【参考文献】

- [1] Y. Masubuchi, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.*, 5, 11–33 (2014).
- [2] Y. Masubuchi, *Molecular Modeling for Polymer Rheology*, in: Ref. Modul. Mater. Sci. Mater. Eng., Elsevier, (2016), pp. 1–7.
- [3] Y. Masubuchi, J.-I. Takimoto, K. Koyama, G. Ianniruberto, G. Marrucci, and F. Greco, *J. Chem. Phys.*, 115, 4387 (2001).
- [4] T. Uneyama and Y. Masubuchi, *J. Chem. Phys.*, 137, 154902 (2012).
- [5] M. Langeloth, Y. Masubuchi, M.C. Böhm, and F. Müller-plathe, *J. Chem. Phys.*, 138, 104907 (2013).

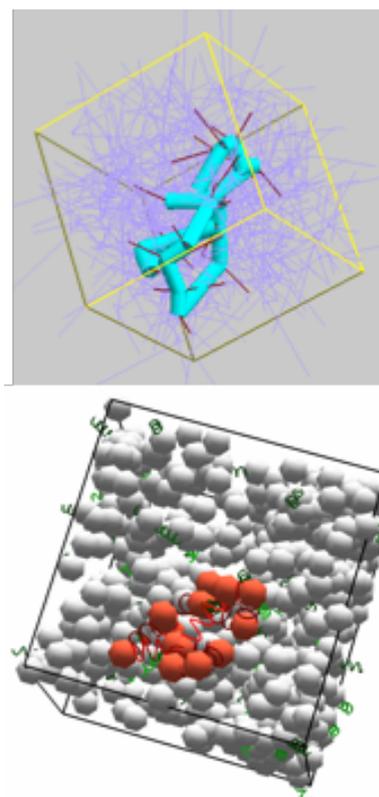


Fig. 1 Snapshot for PCN (top) and MCSS(bottom)