

主 論 文 要 旨

報告番号	① 乙 第	号	氏 名	坂 慎 弥
主論文題目： 結び目の幾何学的拘束が孤立環状高分子に与える影響				
(内容の要旨)				
<p>高分子物理学において、高分子同士の絡まり合いにより生じる幾何学的拘束が系の性質にどのような影響を及ぼすかは、重要かつ基本的な問題である。本研究では、幾何学的拘束が高分子系に及ぼす影響を知ることがを目的とし、良溶媒中の結び目をもつ孤立環状高分子の性質を調べる。結び目をもつ孤立環状高分子は、自分自身との絡まり合いを持つ系の1つであり、幾何学的な拘束の影響を知りにあたり理想的な系である。本研究では、バネ・ビーズ模型のブラウン動力学シミュレーションを用いて、様々なセグメント数 N に対して、結び目をもつ環状高分子の緩和現象、平均構造、結び目部分を調べた。</p> <p>第1章に研究の背景と目的を記す。次に、第2章では結び目理論、第3章では高分子物理学の概略を述べる。第4章ではシミュレーション手法の説明をする。第5章の緩和現象の研究では、環状高分子の緩和率分布に与える結び目型の影響を知ることがを目的とし、セグメント位置のフーリエ変換の時間相関関数から、波数 q に対する緩和率を評価した。その結果、三葉結び目をもつ環状高分子では、各セグメント数の最も遅い緩和率を与える波数が、N の増加に伴い、$N_c = 96 \sim 144$ 付近で $q = 2$ から $q = 1$ へ変化することを明らかにした。この変化は、結び目部分の局在化、すなわち鎖長が長くなるにしたがい、結び目部分が全体に広がった非局在状態から、一部分に局在する状態へと変化することに対応すると推測される。</p> <p>第6章の平均構造の研究では、結び目の3次元構造の直接評価により、結び目部分の局在化を確かめる事を目的とし、結び目をもつ環状高分子の平均構造を調べた。平均構造は、シミュレーションで得た個々の構造を平均構造からの平均二乗変位が最小になるように回転・並進させた後、それらを平均した構造として反復法で得られる。本研究ではホモポリマーを扱うため、高分子構造がもつ対称性を考慮し、新たな定義法を提案した。これらの平均構造を解析した結果、三葉結び目をもつ環状高分子では、平均構造の結び目部分が $N_x = 120$ 付近で局在/非局在の変化を示すことを明らかにした。これは、緩和現象の研究で得られた N_c と一致する。</p> <p>第7章の結び目部分の研究では、結び目部分の大きさの N 依存性を定量的に明らかにする事を目的とし、結び目をもつ部分鎖の新しい定義を提案し、その鎖長 l_K の N 依存性を調べた。従来の結び目部分の定義法では、部分鎖を切り出し、単純な経路で両端をつなぐことにより元の環状高分子と同じ結び目型をもつ部分鎖を探す。その中で、最短な鎖長の部分鎖を、結び目をもつ部分鎖として定義する。本研究では、従来の経路の選び方で避けられなかった誤判定が生じないように、切り出した部分鎖と残りの鎖を内と外に分離する球の表面を経路として選んだ。その結果、結び目部分の鎖長 l_K の平均が N のべき乗則 $\langle l_K \rangle \propto N^t$, $t \simeq 0.8$ にしたがう事を明らかにした。 $t < 1$ より N の増加に伴い結び目部分が局在する事が分かる。</p> <p>最終章では、本論文の結論として、結び目をもつ環状高分子において、結び目部分が局在することが明らかになったことを述べる。</p>				