

ヘテロポリマーの物性とprotein foldingへの応用

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2022-06-06 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Takasu, Masako メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00066197

This work is licensed under a Creative Commons
Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0
International License.



ヘテロポリマーの物性とprotein foldingへの応用

Research Project

All



Project/Area Number

07236216

Research Category

Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas

Allocation Type

Single-year Grants

Research Institution

Kanazawa University

Principal Investigator

高須 昌子 金沢大学, 理学部, 助教授 (50202148)

Co-Investigator(Kenkyū-buntansha)

安藤 敏夫 金沢大学, 理学部, 助教授 (50184320)

Project Period (FY)

1995

Project Status

Completed (Fiscal Year 1995)

Budget Amount *help

¥800,000 (Direct Cost: ¥800,000)

Fiscal Year 1995: ¥800,000 (Direct Cost: ¥800,000)

Keywords

ポリマー / マルチカノニカル / 慣性半径 / DNA

Research Abstract

ヘテロポリマーの物性は、タンパク質のfoldingの問題とも関連しており、興味深い。ここではstickerを持つポリマーに関してマルチカノニカル・モンテカルロ法を用いて平衡状態のconfigurationについて研究した。

モデルとしては、2次元正方格子上にポリマーを配置する。引力が働くstickerがポリマー上に等間隔にあるとする。モノマーを動かすアルゴリズムには、bond

fluctuation methodを採用する。sticker間の相互作用は、最近接の時に $-u(u>0)$,次近接の場合に $-u/2$,それ以外の場合はゼロとする。2つstickerが結合した場合にそれ以上結合できないモデルもあるが、ここでは複数個のstickerの結合を許すモデルを考える。

sticker間の結合エネルギーに比べて、温度が同程度または低い場合、普通のメトロポリス法では位相空間の局所安定な所に状態が捕まってしまって、抜け出すのに時間がかかる。この問題を回避するために、Bergらのマルチカノニカル・モンテカルロ法を用いた。

慣性半径のスケーリング指数に関しては、相互作用の影響で、中性ポリマーに比べて小さい値が得られた。また、慣性半径の分布については、低温では、全部のstickerが集まった状態で小さい半径の所に鋭いピークを持っており、高温では大きい半径の所に広いピークになっている。中間の温度で、両者の共存状態になっており、モンテカルロステップが進むにつれて、両方の状態を行ったり来たりしている。またこのモデルでモノマー数が増えると、転移温度は低くなる傾向がみられた。

半径分布の2つのピークは、DNAの実験でも確認されている。DNAの場合は、クーロン力など長距離相互作用もあり、鎖も長いが、今回のような短距離相互作用のモデルでも同様の現象が見られることは興味深い。

Report (1 results)

1995 Annual Research Report

Research Products (1 results)

AllOther

AllPublications (1 results)

[Publications] 高須 昌子: "Exact calculation of the relaxation for a model of electron transfer" Physical Review E. 52. 418-427 (1995) ▼

URL:

https://kaken.nii.ac.jp/grant/KAKENHI-PROJECT-07236216/

Published: 1995-03-31 Modified: 2016-04-21