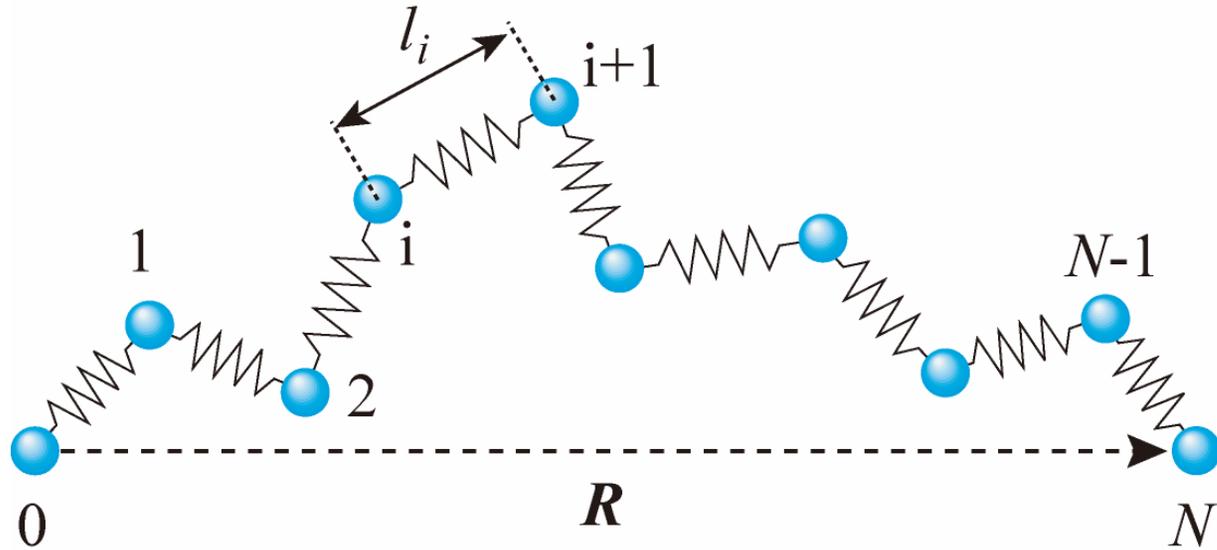


高分子鎖のコンホメーション



理想鎖

- 排除体積なし
- ボンドのポテンシャルエネルギー: 式(8.3.3)

$$U_{\text{bond}}(l_i) = -\frac{1}{2}k_b (l_{\text{max}} - a)^2 \ln \left[1 - \left(\frac{l_i - a}{l_{\text{max}} - a} \right)^2 \right]$$

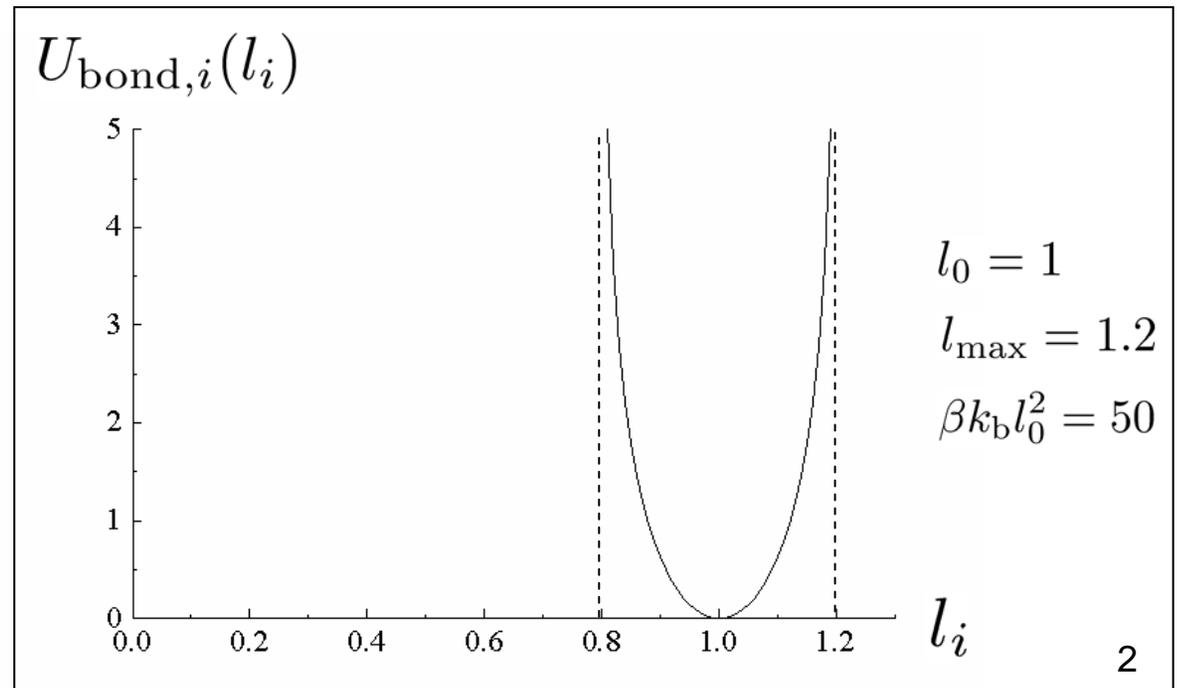
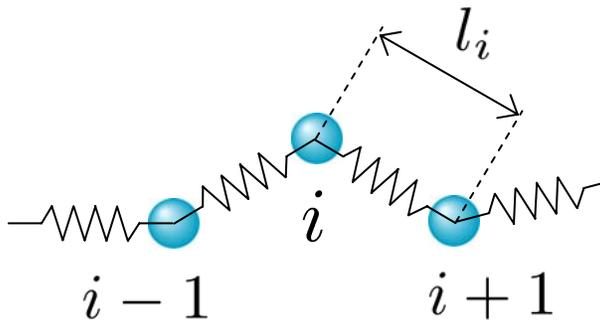
モデル: バネ・ビーズモデル

- ポテンシャル

$$U = U_{\text{bond}}$$

- ボンドのバネポテンシャル: Finitely extensible nonlinear elastic (FENE) potential

$$U_{\text{bond}} = - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2} k_b (l_{\text{max}} - l_0)^2 \ln \left[1 - \left(\frac{l_i - l_0}{l_{\text{max}} - l_0} \right)^2 \right]$$



コンホメーションの解析

平均2乗末端間距離

$$\langle R^2 \rangle = \langle |\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$$

慣性半径の2乗平均

$$\langle s^2 \rangle \equiv \frac{1}{N+1} \sum_i \langle s_i^2 \rangle$$

$$\mathbf{s}_i \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{X}_G$$

$$\mathbf{X}_G \equiv (N+1)^{-1} \sum_i \mathbf{r}_i$$

理想鎖

$$\langle R^2 \rangle_0 = Na^2$$

$$\langle s^2 \rangle_0 = \frac{1}{6} Na^2$$

慣性半径の2乗平均の計算

1. まず, 高分子の重心を計算する.

$$\mathbf{X}_G = \frac{1}{N+1} \sum_i \mathbf{r}_i$$

2. 次に, 各ビーズの重心からの距離の二乗 s_i^2 を計算.

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{X}_G \Rightarrow s_i^2$$

3. s_i^2 を全てのビーズで平均して s^2 を得る.

$$s^2 = \frac{1}{N+1} \sum_i s_i^2$$

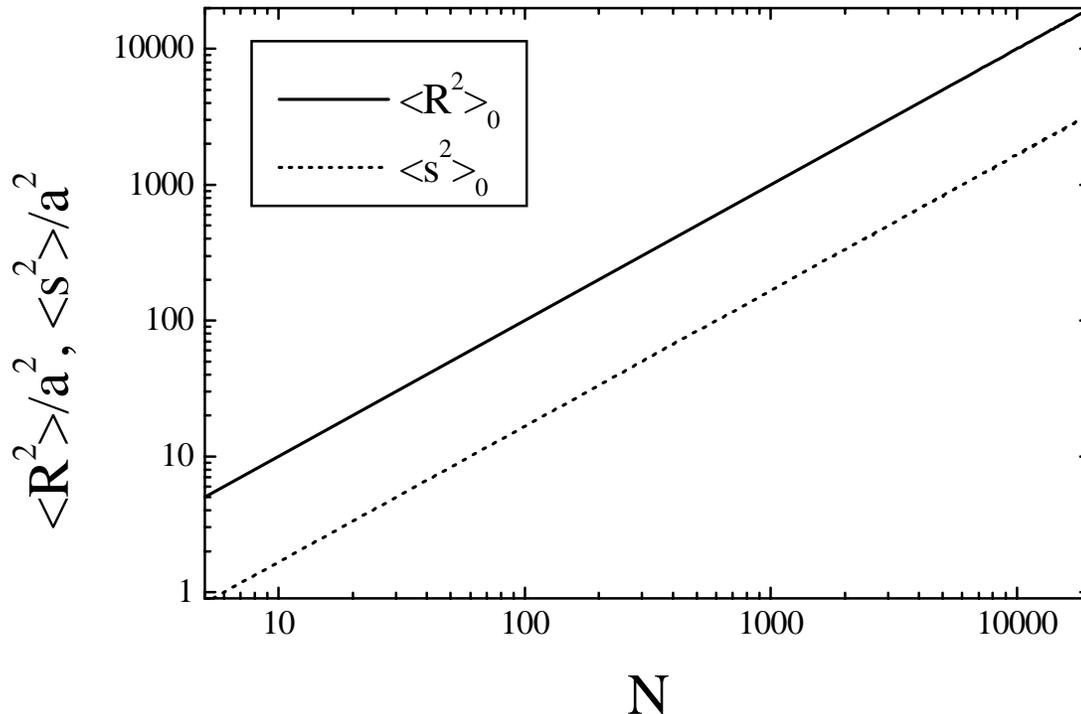
4. モンテカルロステップでの平均を取って平均値を得る.

$$\langle s^2 \rangle$$

5. 最後に値を画面に出力する.

課題

1. polymer_free.cのプログラムの理解
2. $\langle R^2 \rangle$, $\langle s^2 \rangle$ の計算をする部分を追加
3. $\langle R^2 \rangle$, $\langle s^2 \rangle$ をNを10から50程度まで変化させて計算
4. gnuplotを使って作図
5. 理想鎖の値も同じ図にプロットし比較
6. 全て終わった人はpolymer_fix.cを作る.



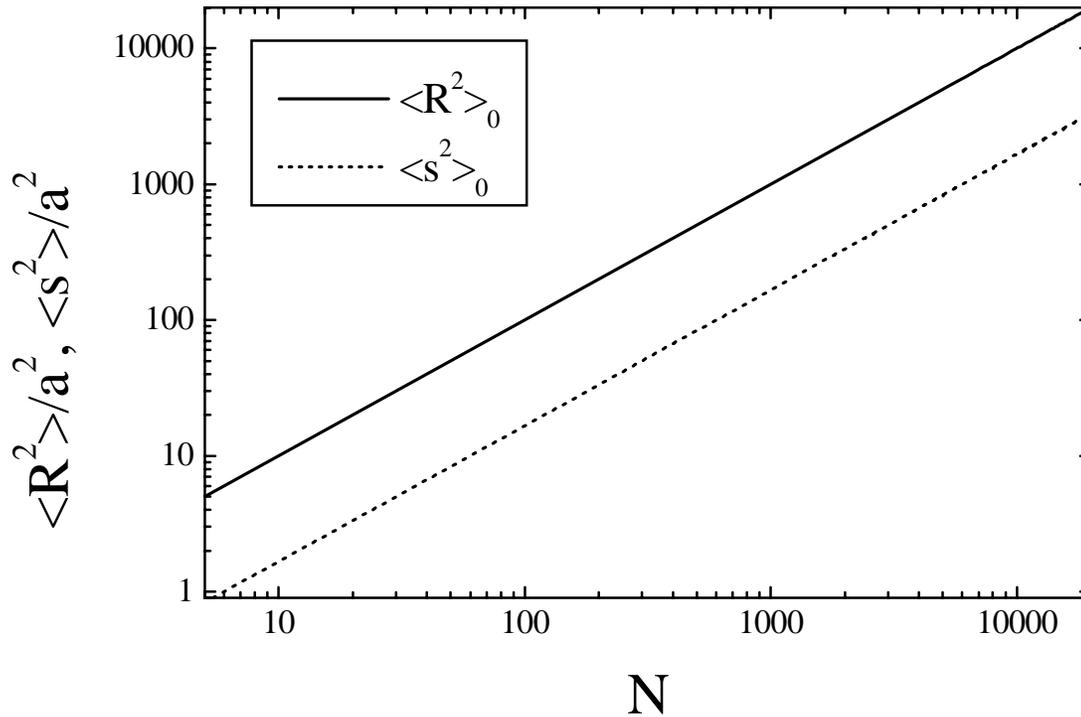
平均2乗末端距離

$$\langle R^2 \rangle_0 = Na^2$$

慣性半径の2乗平均

$$\langle s^2 \rangle_0 = \frac{1}{6}Na^2$$

プロットの仕方



理想鎖の場合

平均2乗末端距離

$$\langle R^2 \rangle_0 = Na^2$$

慣性半径の2乗平均

$$\langle s^2 \rangle_0 = \frac{1}{6}Na^2$$