生物物理学レポート (K3)

理学部化学科 3 年 05253011 Fumiya Kashiwai / 柏井史哉

2025 年 12 月 18 日

液-液相分離 (LLPS) は細胞内相分離など、生物学的に重要な役割を果たすと考えられる。その記述に用いられる基礎的な理論が Flory-Fuggins モデルであり、binodal 境界を与える厳密解は知られていなかった。

臨界点付近においては、Ginzburg-Landau 展開により記述することが可能であるが、相互作用パラメータ χ が大きくなると破綻することが知られている。この研究では、自己無撞着方程式を解くことにより、少ない回数の反復により正確な解を得られることが示された。

1 Statement

長さ N のポリマーを均一な溶媒に体積割合 ϕ で混合することを考える。この時、自由エネルギー $F(\phi)$ は次のように記述される。

$$f(r) = \frac{\phi}{N} + (1-\phi)\ln(1-\phi)L\chi\phi(1-\phi) \tag{1.1}$$

ただし $k_BT = 1$ ととった。臨界点の周りの微小摂動 $\phi = \phi_c + \delta\phi, \chi = \chi_c + \delta\chi$ をとり、Ginzburg-Landau 展開を用いて考えると、2 次の相転移を起こしていることがわかる。さらに、平衡点付近での ϕ は、次のように記述される。

$$\phi_\pm^{\mathrm{bin}} = \phi_c \pm \sqrt{\frac{3\delta\chi}{2\chi_c^2\sqrt{N}}} + O(\delta\chi) \tag{1.2}$$

ここで、binodal 点における要請 $f'(\phi) = 0$ より、次の自己無撞着方程式が従う。

$$\phi = \frac{1}{1 + \exp -2\phi\chi + \chi} = g(\chi) \tag{1.3}$$

$$\phi_\pm^0 = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{3\delta\chi}{8}} \tag{1.4}$$

を出発点として、$\phi_\pm^{(i+1)} = g(\phi_\pm^{(i)})$ として $\phi_\pm^{(i)}$ を与えると、バナッハの不動点定理により、式 (1.3) の解を与えると期待される。

実際、高々 2 回の反復により得られる

$$\phi_\pm^{(2)} = \frac{1}{1 + \exp\left[-\chi\tanh\left(\pm\chi\sqrt{\frac{3\delta\chi}{8}}\right)\right]} \tag{1.5}$$

は、数値的に計算した Flory-Huggins モデルの解と良い精度で一致することが示された。Newton 法などによる計算、実験結果のフィッティングには時間を要していたが、この手法では簡便に、かつ正確な解を求めることができていると考えられる。