

## 東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会

(代表:東北大学工学部 畠山力三教授、平成18年2月23日)

### 強い静電相互作用によるナノ凝縮系・DNAの構造形成

田中基彦 (核融合科学研究所、連携研究推進センター)

静電相互作用や分子間力はプラズマのみならず、生体系を含む常温の凝縮系の構造形成、機能発現で重要な役割を果たしている。デバイ遮蔽を大きく超えるマクロイオンの電荷反転現象[1]、DNAの膜孔通過[2]などでは、強いクーロン力と塩イオンの存在が効く。また炉材やナノ素材に使われるグラファイトは水素吸着により表面破壊(エッチング)が自発的に進行する[3]。これらの現象の、古典的および第一原理(量子力学)分子動力学法による最近の研究について紹介したい。

参考資料 : <http://dphysique.nifs.ac.jp/>

- [1] M.Tanaka, The effects of asymmetric salt and a cylindrical macroion on charge inversion: Electrophoresis by molecular dynamics simulations, Physical Review, E68, 061501 (2003).
- [2] Y.Rabin and M.Tanaka, DNA in nanopores ? Counterion condensation and coion depletion, Physical Review Letters, 94, 148103 (2005).
- [3] T.Koga and M.Tanaka, First-principles molecular dynamics studies of plasma- surface interaction, Korean Journal of Physics, in press (2006).