

機関番号：15501

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20550190

研究課題名(和文) らせん高分子の構造形成における分子認識—新たな計算スキームを
目指して—研究課題名(英文) Molecular recognition during crystallization of helical polymers
- Toward new computational schemes -

研究代表者

山本 隆 (YAMAMOTO TAKASHI)

山口大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：00127797

研究成果の概要(和文)：

本研究では、複雑な螺旋高分子における結晶化の分子過程とそこでの明瞭な分子認識メカニズムの解明を目指した。まず、分子内自由度を凍結した分子モデルを用いた大規模なMC計算から結晶のキラリティーと格子対称性が明瞭な一対一の対応を示すことを明らかにした。更に、上記の拘束を外した一般的な条件下での秩序構造形成の研究から、キラルな六方相の結晶化が著しく速いこと、配向非晶質状態からの結晶化では成長速度が非常に加速されることなどを見出し、螺旋高分子が分子内・分子間秩序の高度な協同過程を通して三次元結晶を形成していく過程を“直接観測”することに成功した。

研究成果の概要(英文)：

In this project, we have explored the molecular mechanism of crystallization in helical polymers having large pendant groups, such as iPP, where remarkable feat of chirality selections is known to be operative. Our goal is extremely difficult to reach, just like that of prediction of protein folding. We here adopted a stepwise approach, starting from assuming the molecules to be rigid. We found that the rigid molecules show clear crystallization with definite chirality selection. Then we extended our molecular model into a fully flexible one, where we studied detailed interchain and intrachain cooperative ordering during crystallization from the melt, in which we have taken advantage of very fast crystallization in the molecular systems of both isochiral chains and oriented amorphous state.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2009年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2010年度	900,000	270,000	1,170,000
年度	0	0	0
年度	0	0	0
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：材料化学・高分子・繊維材料

キーワード：らせん高分子、構造形成、結晶化、分子認識、コンピュータ・シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

プラスチックや衣類、導電性高分子材料から人工臓器にいたるまで、我々は高分子に囲まれて生活をしている。我々の体もDNA、タンパク質などの高分子が作る複合体である。タンパク質などに端的に見られるように、高分子には低分子には見られない独特な構造形成の能力がある。しかし、その構造形成のメカニズムの解明は、単純な構造を持つ合成高分子においてさえ困難を極めている。互いに絡まりあった高分子鎖が、絡み合いを解きほぐしながら規則正しく折り畳まれて三次元秩序構造を形成する、その分子過程は、近年様々な分野で大きな関心を集めており、高分子科学や生命科学の根幹であると同時に、基礎物理学的にも大変興味深いテーマである。

結晶は我々になじみの深いありふれた存在であるが、その成長過程（自己集合過程）には、酵素や触媒と同様な厳格な分子認識が存在する。例えば、分子に右手系、左手系の相違があるとき、結晶はそのいずれかの分子を注意深く選択しながら結晶内に取り込んでおり、成長界面では厳しい分子認識が行われている。高分子の結晶成長でも同様な分子過程が生起している。そこでは、成長界面での分子鎖の大きな構造変化や立体構造のゆらぎを通して、特異的な分子認識を伴った構造形成が行われていると考えられる。

高分子の結晶化は半世紀以上にわたって精力的に研究されてきた。“構造形成の分子過程を実験的に直接観察することが不可能である”という高分子系特有の問題が、基本的な分子鎖の折り畳みメカニズムの解明を著しく困難なものにしている。この様な実験的研究の閉塞状態を打破すべく、分子シミュレーションを用いた研究が近年世界的に大きな関心を集めている。我々は、高分子結晶化の“直接観察”を目指して世界に先駆けた研究を行い、ポリエチレンのような比較的単純な構造を有する直線状の高分子に対しては分子動力学(MD)法を用いて結晶化の分子過程を再現することに成功した。

2. 研究の目的

近年我々は、結晶化の分子過程の“直接観察”の対象を、単純な構造を有する直線線状の高分子から、より複雑な構造を有するらせん高分子に拡大してきた。螺旋高分子の結晶成長の素過程は、成長界面での分子内秩序化（らせん形成）や結晶成長過程における分子認識（らせん認識）など、非常に興味深い問題を含んでいる。我々は、このような螺旋高分子の結晶化を計算科学的に取り扱うに際して、基本的な素過程の複雑性や秩序形成の特徴時間スケールの観点から、螺旋高分子を“裸

の螺旋高分子”（PTFE, POM, など）と大きな側鎖を有する“一般の螺旋高分子”（iPP, iPS, など）に分けて論じることが有用であると考えた。事実、裸の螺旋高分子に対しては、MD法を用いることによって、三次元空間での折り畳み結晶化を容易に観測できることを見出した。

他方、“一般の螺旋高分子”の結晶化は極めて緩慢であり、直接的な分子シミュレーションが可能な計算時間内では、到底結晶化が起きないことも分かった。唯一、結晶化の素過程を観察する方法として、系の幾何学的次元を制限する方法が有効であり、例えば二次元空間に閉じ込められた系では結晶の成長界面への分子鎖の吸着と結晶化過程を明瞭に観測出来ること、またそこでは鮮やかな分子認識（らせん選択）過程が観測されることを明らかにした。

我々は、より現実的な三次元空間での結晶化を直接的に観測し、そこでの螺旋分子の秩序化過程を明らかにしたい。本プロジェクトでは、“一般の螺旋高分子”（典型的な分子としてiPPを考える）の三次元空間での結晶化過程を直接に再現し、その詳細な分子過程を究明することを目指した。

高分子結晶化の分子メカニズムの解明は、高分子科学の歴史的な課題である。そこでは、特異的な分子間相互作用などを持たない、典型的な分子鎖の折り畳み結晶化過程が議論の中心であった。我々は、高分子結晶化の計算科学のフロンティアにも新たな挑戦を始める。

高分子結晶化を複雑にしている因子として、多くの高分子で見られる、分子鎖間の強い相互作用（水素結合、静電的相互作用）がある。そこで、分子間に強い相互作用が存在する系での結晶化のメカニズムにも注目した。

また、高分子の秩序化と分子認識過程は、結晶化過程以外にも観測される。例えば、ポリエチレングリコールがシクロデキストリンと包接化合物を形成することは非常に有名で、多くの研究がなされている。分子レベルでの計算によって、包接過程における分子鎖長の識別過程のメカニズムを究明する。

3. 研究の方法

複雑な内部構造を有する螺旋高分子の結晶化には、分子内自由度と分子間自由度の協同的な振る舞いが必須である。このような過程を解明するために、我々は以下のような段階的な戦略をとった。

(1) 複雑な螺旋高分子の秩序形成を一般的に取り扱うことには、非常に大きな計算負荷が予想される。他方、結晶格子の対称性と結晶

の螺旋センス（結晶のキラリティー）との間には非常に美しい対応が予想される。そこで、分子内自由度をひとまず凍結し、分子鎖を剛直な螺旋分子モデルと仮定し、分子鎖のパッキングだけに注目したMC計算を行う。高分子結晶化における格子対称性と螺旋対称性との関係を明らかにすることを旨とした。MC法では非物理的分子運動（自由な螺旋センスの反転など）が可能であり、非常に緩慢な過程に対しても、その秩序形成過程の本質を探索することが可能である。結晶化過程の直接観察を通して、結晶多形の出現のメカニズムの解明、分子パッキングの対称性（格子の対称性）と結晶のキラリティー（螺旋センスの対称性）の相関、などを明らかにする。

(2) 複雑な内部構造を有する高分子の秩序形成は、歴史的な問題であるタンパク質のフォールディングと同様に、非常に困難な課題である。しかし、単純な内部構造を有する直鎖状のモデル高分子に対する以前の研究から、高度に分子配向した液体においては、結晶化が著しく加速されることを見出した。ここでは、同じアプローチを複雑な螺旋高分子に対しても適用した。

(3) 我々は、水素結合性の高分子（Nylon, PEGなど）の結晶化における特異な構造形成の実験的研究も行って来た；PEGでは、バラの花状の球晶が、Nylonではマリ藻のような形状を示す球晶が観測された。このような複雑なモルフロジー発現の背景には、高分子溶液中での高分子と溶媒分子との特異的な相互作用の関与が予想される。そこで、分子内に強い分子間相互作用点を有するモデル高分子を構築し、その系での結晶化過程を分子動力学シミュレーションを用いて明らかにする。

また、高分子-高分子や高分子-低分子の複合体に対しても、適切なモデル化と分子シミュレーションにより、複合化過程の本質や特異な分子認識過程の詳細なメカニズムを明らかにする。

4. 研究成果

本研究では、典型的な螺旋高分子が示すキラリティーの認識を伴った秩序化（結晶化）過程を計算科学的に明らかにすることが最大の課題である。らせん構造を形成する高分子の秩序化では、分子内と分子間の秩序化が協同的に進行するが、単純な線形高分子の場合と比べて、らせん高分子では前者の過程が非常に緩慢で、全体の結晶化速度を著しく遅くしている。我々は、典型的な螺旋構造を示すモデル高分子として *isotactic polypropylene* (iPP) をターゲットにして研究を開始した。

まず、分子内自由度の秩序化は完成したものと仮定し（分子鎖を秩序らせん構造をもった剛体と仮定する）、分子間秩序の形成過程に注目して詳細なモンテカルロ (MC) 研究を行った。iPPの結晶では、系のキラリティー（右巻き螺旋と左巻き螺旋の存在割合）が結晶の構造と密接に関係している（最安定な α 結晶はラセミック、準安定な β 結晶はキラルな結晶である）ことが実験的に示されている。しかし、その詳細な結晶構造、特に結晶キラリティーと格子の対称性との関連は明らかになっていない。我々は、上記MC計算により、キラル相（ β 相）やラセミック相（ α 相）の結晶形成過程が明瞭に観測出来ることを見出した。また、 α 相のようにRL分子鎖規則正しく配列したラセミックな構造を形成する分子過程は、キラルな β 相が成長する過程と比べてはるかに複雑で、その結晶化速度も著しく緩慢であることが示された。

更に、分子パッキングが高度に乱れた状態（液晶的な状態）から急速に冷却することにより、 α 相や β 相とは全く異なり、分子鎖のRL配置（長距離秩序）が高度に乱れた新たな凝集構造が観測されることも見出した。この相の詳細な結晶構造が未だ不明であるが、実測されているメソフェーズ（いわゆるスメクティック相）に良く対応することも確認した。

上記MC計算から、分子のらせん反転が起きない系（固定したキラリティーを持つ系）では、結晶化が迅速に進行することが示唆された。そこで、分子内自由度を厳密に考慮した一般的な条件下での三次元秩序構造形成においても、系のキラリティーを仮定（系がどちらかのセンス螺旋高分子だけで構成されていると仮定）した場合は、速い折り畳み結晶化過程が観測されるものと予想した。MD計算の初期状態としてキラルなランダムコイルを用意し、そこからの結晶成長過程を観測した。この場合、予想通り分子鎖の秩序化過程は著しく加速されることを見出した。この事実は、らせん反転が分子内秩序化の大きな障害であり、それが分子間の秩序化を阻害し、系の結晶化を極めて緩慢なものにしていることを示している。

現実のiPPでは、キラルな螺旋分子鎖の結晶化過程は β 相の結晶化に対応し、この相の秩序化過程が極めて特異なものであることを示唆している。更に我々は、同一センスの螺旋分子鎖の凝集において、非常に興味深い重螺旋構造（二重らせん、三重らせんなど）の出現も見出した。この現象が現実の β 相の結晶成長過程にどのような意味を有しているにはいまだに不明であるが、例えば β 相結晶が示す特徴的なモルフロジー（バンド球晶の出現）と関係しているのかも知れない。

上記のような、様々な仮定・拘束を除いた一般的な場合に、螺旋高分子の結晶化過程を直接的に観測することは絶望的思える。しかし、我々は過去に、もう一つの重要な足掛かりを見出している。すなわち、単純な直線状の高分子の系では、分子を高度に配向させた液体（配向非晶質）からの結晶化は著しく高速であることを見出した。そこで、同じ戦略を iPP に対しても適用した。

先ず iPP の等方的な液体状態を作成し、それに適切な延伸・圧縮を施し、一軸伸長試料作製した。この配向液体を様々な結晶化温度に保持し、そこでの秩序構造の発生を注意深く観測した。以前の行った PE 系での結晶化と比べると、iPP が結晶化を示す条件（温度、計算時間）は非常に微妙で、多くの試行錯誤が必要であったが、最終的に、iPP でも配向非晶質状態からの結晶秩序の発生（繊維構造の形成）を観測することに成功した。

観測された結晶構造は、当初に予想した α 相（右巻き螺旋と左巻き螺旋が秩序正しく構造）ではなく、いわゆるスメクティック相に対応した乱れた結晶相であった。計算機実験で実現される結晶化速度が極めて大きな過冷却状態に対応することを考えると、このようなスメクティック構造の出現は自然な結果であるといえる。

今回の研究では、通常の高分子結晶化以外に、高分子とシクロデキストリンの包接現象の分子過程の解明や鎖長認識過程のメカニズムの解明にも取り組んだ。また、分子間に強い相互作用が存在する水素結合系高分子の示す特異な結晶成長過程の研究も行い、非常に興味深い分子過程を見出した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 12 件）

- ① Kinetic Study of the II-I Phase Transition of Isotactic Polybutene-1, M. Maruyama, Y. Sakamoto, K. Nozaki, T. Yamamoto, H. Kajioka, A. Toda, and K. Yamada, *Polymer* **51**, 5532-5538 (2010) 査読有り
- ② n-アルカン薄膜の構造形成における基板構造の効果、三根雅生、浦上直人、野崎浩二、山本隆、高分子論文集 **67**, 198-202 (2010) 査読有り
- ③ 高分子の核形成と結晶成長の分子動力学シミュレーション、山本隆、日本結晶成長学会誌 **37**, 50-56(2010) (総説) 査読有り
- ④ Simulation of pseudo-polyrotaxane formation and orientational order between pseudopolyrotaxane, N. Urakami, J. Imada, T. Yamamoto, *J. Chem. Phys.* **132**, 054901(1-7)

(2010) 査読有り

- ⑤ Molecular Dynamics of Reversible and Irreversible Melting in Chain-Folded Crystals of Short Polyethylene-like Polymer, T. Yamamoto, *Macromolecules*, **43**, 9384-9393 (2010) 査読有り
- ⑥ Molecular dynamics simulations of polymer crystallization in highly supercooled melt: primary nucleation and cold crystallization, T. Yamamoto, *J. Chem. Phys.* **133**, 034904(1-10) (2010) 査読有り
- ⑦ 結晶化を利用した高分子ナノ構造粒子の創生, 崎本亮, 庄司達也, 久戸瀬由衣, 山本隆, 高分子論文集 **66**, 591-597 (2009) 査読有り
- ⑧ Computer Modeling of Polymer Crystallization -Toward Computer Assisted Materials' Design-, T. Yamamoto, *Polymer* **50**, 1975-1985 (2009) (Feature Article) 査読有り
- ⑨ Nano-meter-sized domain formation in lipid membranes observed by small angle neutron scattering, T. Masui, N. Urakami, and M. Imai, *Eur. Phys. J. E*, **27** (2008) 379-389. 査読有り
- ⑩ Lamellar to micelle transition of nonionic surfactant assemblies induced by addition of colloidal particles, Y. Suganuma, N. Urakami, R. Mawatari, S. Komura, K. N. Yaegashi, and M. Imai, *J. Chem. Phys.*, **129**, 134903(1-10) (2008). 査読有り
- ⑪ Structure of multilayered thin films of long-chain molecules: X-ray scattering study, K. Tanaka, K. Ishikawa, K. Nozaki, N. Urakami, T. Yamamoto, *Polymer J.* **40**, 1017-1024 (2008) 査読有り
- ⑫ Molecular dynamics simulation of steady state crystal growth and homogeneous nucleation in polyethylene like polymer, T. Yamamoto, *J. Chem. Phys.* **129**, 184903(1-11) (2008) 査読有り

〔学会発表〕（計 43 件）

- ① 秩序構造形成過程のモレキュラー・ダイナミクス、山本隆 *Polymer Preprint, Japan* **59**, 3417 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ② n-アルカン多層薄膜の構造解析、池本一輝・野崎浩二・山本隆 *Polymer Preprint, Japan* **59**, 2879 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ③ 固体基板上における n-アルカン薄膜の構造形成解析：分子動力学シミュレーション、三根雅生・浦上直人・野崎浩二・山本隆 *Polymer Preprint, Japan* **59**, 3012 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ④ アイソタクチックポリプロピレンの $\alpha 1$ 相と $\alpha 2$ 相の構造形成 II-温度ジャンプアニーリングにおける構造変化、佐藤香野・野崎浩二・戸田昭彦・梶岡寛・田頭克春・山田浩司・山本隆 *Polymer Preprint, Japan* **59**, 3013 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ⑤ 溶液結晶化によるナイロン 6 微粒子の生成、久戸瀬由衣・山本隆 *Polymer Preprint, Japan* **59**, 3016 (2010.9.15) 北海道大学・北海道

- 海道
- ⑥ ベシクルの形態変化メカニズムの解析－散逸粒子動力学シミュレーション、野口威照・浦上直人・今井正幸・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 3116 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ⑦ ドロップレットの形状変化における高分子鎖の影響、黒川敬久・浦上直人・今井正幸・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 3117 (2010.9.15) 北海道大学・北海道
- ⑧ アイソタクチックポリブテン1結晶のII-I相転移の加速メカニズム、丸山真範坂本侑佑・山田浩司・梶岡寛・野崎浩二・戸田昭彦・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 1110 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑨ アイソタクチックポリプロピレンの $\alpha 1$ 相と $\alpha 2$ 相の構造形成、佐藤香野・野崎浩二・山田浩司・梶岡寛・田頭克春・戸田昭彦・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 1111 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑩ 固体基板上におけるn-アルカン薄膜の構造形成過程：分子動力学シミュレーション、三根雅生・浦上直人・野崎浩二・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 828 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑪ 高分子閉じ込めによる球状ドロップレットの形状メカニズム、黒川敬久・浦上直人・今井正幸・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 851 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑫ 高分子過冷却液体の構造と秩序の発生－分子動力学シミュレーション－、山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 1050 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑬ らせん高分子(iPP)結晶化のモレキュラー・ダイナミクス；分子動力学シミュレーションによる直接観察、山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 1109 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑭ 薄膜系とバルク系における最安定構造と相転移－偶数n-アルカンの場合、池本一輝・野崎浩二・山本隆 Polymer Preprint, Japan 59, 827 (2010.5.26) パシフィコ横浜・神奈川県
- ⑮ 高分子結晶の核形成と成長過程のモレキュラー・ダイナミクス(高分子基礎物性・高分子計算機科学合同研究会)(2010.3.2) 東京大学・東京
- ⑯ 固体基板上のn-アルカン薄膜の構造形成：分子動力学シミュレーション、三根雅生、浦上直人、野崎浩二、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 974 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ⑰ 環状分子による鎖長認識メカニズムの解析、浦上直人、今田絢子、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 1045 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ⑱ 生体膜上における脂質ドメイン形成メカニズム、浦上直人、緒方祐介、佐久間由香、今井正幸、山本隆, Polymer Preprint, Japan 58, 2029 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ⑲ 螺旋高分子 iPP 折畳み結晶化の分子動力学、山本隆, Polymer Preprint, Japan 58, 1121 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ⑳ アイソタクチックポリブテン1のII-I固相転移－ガラス転移点付近における相転移挙動、丸山真範、野崎浩二、山本隆、山田浩司、梶岡寛、戸田昭彦、Polymer Preprint, Japan 58, 1125 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ㉑ ナイロン6－結晶性微粒子の表面装飾：金属とのコンプレックス形成、久戸瀬由衣、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 1153 (2009.5.27) 神戸国際会議場・兵庫
- ㉒ アイソタクチックポリブテン1のII-I固相転移－ガラス転移点付近における相転移挙動、丸山真範、野崎浩二、山本隆、山田浩司、梶岡寛、戸田昭彦、Polymer Preprint, Japan 58, 3753 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉓ 分子シミュレーションは螺旋高分子の結晶化にどこまで迫れるか？, Polymer Preprint, Japan 58, 3594 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉔ モデル高分子鎖の結晶化と融解の分子過程、山本隆, Polymer Preprint, Japan 58, 3596 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉕ 固体基板上のn-アルカン薄膜の構造形成：分子動力学シミュレーション、三根雅生、浦上直人、野崎浩二、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 3388 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉖ アイソタクチックポリプロピレンの結晶化－格子パラメータと多形の結晶化温度依存性、野崎浩二、佐藤香野、山田浩司、梶岡寛、戸田昭彦、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 3392 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉗ ナイロン6－結晶性微粒子の表面装飾：金属とのコンプレックス形成、久戸瀬由衣、山本隆, Polymer Preprint, Japan 58, 3393 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉘ 高分子鎖の閉じ込めによる油中水滴型ドロップレットの形状変化、黒川敬久、浦上直人、今井正幸、山本隆, Polymer Preprint, Japan 58, 3399 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉙ 余剰面積の変化によるベシクルの変形シミュレーション、野口威照、浦上直人、今井正幸、山本隆、Polymer Preprint, Japan 58, 4879 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉚ 擬ポリロタキサンの形成と鎖長認識シミュレーション、浦上直人、今田絢子、山本隆 Polymer Preprint, Japan 58, 3713 (2009.9.19) 熊本大学・熊本
- ㉛ ポリマーにおける結晶化と融解のモレキュラー・ダイナミクス(結晶成長国内会議；NCCG-39,) (2009.11.13) 名古屋大学・愛知
- ㉜ Molecular Dynamics of Crystallization and melting in model polyethylene (International

Discussion Meeting on Polymer Crystallization, Shanghai) , T. Yamamoto, (2009.8.15) 上海中国

- ③③ 結晶性高分子のナノ構造微粒子、山本隆、崎本亮、庄司達也、*Polymer Preprint, Japan 57, 3297* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③④ 高分子折り畳み結晶化と融解過程の分子的シナリオ、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 3255* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③⑤ 様々な長鎖分子多層膜の構造、田中研、野崎浩二、浦上直人、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 3691* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③⑥ ナノサイズベシクルにおける脂質ドメインの形成とダイナミクス、浦上直人、緒方祐介、今井正幸、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 1888* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③⑦ アイソタクチックポリブテン1の準安定相を経由した結晶化、丸山 真範、野崎浩二、山本 隆、山田 浩司、*Polymer Preprint, Japan 57, 3532* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③⑧ ナノサイズベシクルにおける脂質ドメインの融合と分裂過程、浦上直人、緒方祐介、佐久間由香、今井正幸、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 3139* (2008.9.24) 大阪市立大学・大阪
- ③⑨ 包摂化合物形成における分子認識シミュレーション、浦上直人、今田絢子、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 854* (2008.5.28) パシフィコ横浜・神奈川
- ④⑩ アイソタクチックポリブテン1のII-I固相転移カイネティクス、丸山 真範、野崎浩二、山本 隆、山田 浩司、*Polymer Preprint, Japan 57, 812* (2008.5.28) パシフィコ横浜・神奈川
- ④⑪ 高分子結晶の定常的成長と融解過程のモレキュラー・ダイナミクス、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 668* (2008.5.28) パシフィコ横浜・神奈川
- ④⑫ 結晶性高分子の微粒子生成と構造、山本隆、浅野隆聡、崎本亮、庄司達也、*Polymer Preprint, Japan 57, 667* (2008.5.28) パシフィコ横浜・神奈川
- ④⑬ らせん高分子の結晶化と分子認識、山本隆、*Polymer Preprint, Japan 57, 666* (2008.5.28) パシフィコ横浜・神奈川

[図書] (計 1 件)

- ① *Molecular Dynamics in Crystallization of Helical Polymers: Crystal Ordering and Chirality Selection*, T. Yamamoto, *Understanding Soft Condensed Matter via Modeling and Computation* (Series in Soft Condensed Matter, World Scientific, Ed. D.

Andelman and G. Reiter) pp. 133-177 (2010)

[産業財産権]

○出願状況 (計 1 件)

名称：ポリエチレンテレフタレート樹脂微粒子の製造方法およびポリエチレンテレフタレート樹脂微粒子

発明者：山本隆、西麻里子、崎本亮、庄司達也

権利者：国立大学法人山口大学
宇部興産

種類：特許

番号：(特許出願 2008-137966)

出願年月日：平成 20 年 5 月 27 日

国内外の別：国内

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://mms.sci.yamaguchi-u.ac.jp/~yamamoto/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本 隆 (YAMAMOTO TAKASHI)

山口大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：00127797

(2) 研究分担者

浦上 直人 (URAKAMI NAOHITO)

山口大学・大学院理工学研究科・講師

研究者番号：50314795

(3) 連携研究者

なし