

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：52101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26390138

研究課題名(和文) ソフトマテリアルの異方的形態変化：モデル化と数値シミュレーション

研究課題名(英文) Modeling and numerical simulations for anisotropic shape transformation of soft materials

研究代表者

鯉渕 弘資 (KOIBUCHI, Hiroshi)

茨城工業高等専門学校・機械システム工学科・教授

研究者番号：00178196

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：リキッドクリスタルエラストマのソフト弾性と呼ばれる応力ひずみ曲線，などはそのメカニズムがよく分からない現象の一つである。そこで，当研究では，このように複雑な物質内部構造の変化を直接求めることはあきらめて，その代わり物質内部の長さの単位が変化することで応力の特異性などがおこると考える。このような考え方に沿って構成されたフィンズラー幾何モデルによって，すでに知られている実験結果と首尾一貫する数値計算結果が得られた。

研究成果の概要(英文)：The so-called soft elasticity in the stress-strain diagram of Liquid Crystal Elastomer is one of the phenomena in which the mechanism is unclear. In this study, we discard to calculate directly the complex structural changes inside the material, and instead we consider that the origin of the specific behavior in the stress comes from the changes in the length scale inside the material. By using Finsler geometry model constructed along such considerations, we successfully obtain numerical results which are consistent to the existing experimental data.

研究分野：計算科学

キーワード：モデリング ポリマー 液晶 リキッドクリスタルエラストマー Monte Carlo

1. 研究開始当初の背景

「脂質分子膜」や「液晶エラストマ」などのソフトマテリアルに起こる異方的な形態変化には、人工筋肉など様々な応用が期待されている。しかし、この形態変化の要因の一つが分子の向きにあるのは明らかであるにもかかわらず、そのメカニズムはほとんど未解明である。

2. 研究の目的

そこで、当研究では異方的形態変化のメカニズムを解明することを目的とする。具体的な目標は次の2つになる：(1)分子の向きと全体の形を結ぶ「計量」に着目することによって、異方的形態変化の数学的モデルを構築する。(2)このモデルで「分子配向性と形態変化の深い関係」を明らかにする。

3. 研究の方法

研究の方法は、数学的モデル化と数値シミュレーションである。具体的には、既に報告されている異方的変形に関する実験結果を対象として、分子の向きと全体の形を結ぶ「計量」に着目した Finsler 幾何(FG)モデルを適用する。FG モデルは、球面等を3角形分割した3角形格子、または、球体等を4面体で分割した4面体格子の上で定義し、統計力学的な Monte Carlo(MC)シミュレーションの方法で計算する。

4. 研究成果

研究対象としては、実験的に良く研究されている(1)2成分脂質分子膜に起こる異方的形態変化、(2)3次元物質 LCE の異方的形態変化、(3)LCE におけるソフト弾性と呼ばれる応力ひずみ曲線、である。これらの現象は、物質を構成する分子(液晶など)の内部自由度と物質の形を決めるその分子の位置自由度の間の相互作用によるものと定性的には理解されている。しかし、それは、異方性と非線形性が伴うことによる複雑さのために、これまで直接には扱えなかった相互作用である。

FG モデルでは、このように複雑な物質内部構造変化による物質の変形を直接求めることはあきらめて、その代わり物質内部の長さの単位が変化し、このことが原因で LCE の異方的変形や応力の特異性が現われる、と考える。本研究では、この考え方に基づいた FG モデルにより、すでに知られている(上記の)実験結果と首尾一貫する数値計算結果を得ることができた。以下に、これらについて少し詳しく述べる。

(1)まず、2成分脂質分子膜の異方的変形に関しては、3角形分割した膜面上に2成分のスカラー関数(例えば ± 1)を考え、これを2種類の脂質分子(状態)に対応させる。この分子の種類(状態)がモデルの「内部自由度」になる。このとき同時に、これを磁性

体のモデルとして知られる Ising モデルのスピン変数と対応させる。即ち、同種類の脂質分子が隣り合う方が、異種類の場合よりも安定と仮定する。但し、2種類の分子の数の割合は膜面上一定とするが、3角形が膜面上を拡散できるように動的3角形分割のMC法を用いることで、隣り合う分子の種類は自由に変われるようにする。このとき、3角形を占めている分子の種類によって、その Finsler 計量関数をうまく決めておけば、この分子の種類によって表面張力と曲げ剛性が変化し、このことによって、膜の形が変化するようになる。これが、FG モデルによる形態変化の理解の方法である。更に、Ising モデルのエネルギーは、同種分子のドメイン境界の長さに比例するから、この Ising モデル Hamiltonian がこれまでよく知られている線張力 Hamiltonian に対応する。即ち、FG モデルでは、同種分子が集まりやすいという性質がそれらのドメイン境界に働く線張力の起源になると考える(論文2,8,学会発表4)。

(2)LCE の異方的変形に関しては、「3角形分割された曲面上で定義された2次元FG膜モデル」を「4面体分割された3次元領域で定義された3次元FGモデル」に拡張する。この拡張は自然なものである。このモデルでは内部自由度は液晶分子の方向自由度になる。は単位球面に値を持つ単位ベクトルとして導入されるが、実際の液晶分子では非極性相互作用を仮定するので、その場合には向きの自由度としては1方向のみとなる。の4面体による座標軸方向成分を「Finsler 長」としてモデルに取り入れることで、内部自由度と「外部自由度」の分子位置 r の相互作用が直接モデルに定義される。液晶分子は Polymer の位置と解釈できるので、この相互作用は液晶と Polymer の相互作用ともいえる。このような分子間相互作用は全く新しいもので、しかも、実験結果と首尾一貫した異方的変形を引き起こす。実際、液晶でおなじみの Lebwohl-Lasher 型のポテンシャルによって、が同じ向きに配向すると、その向きに形が変形し、実験結果と一致した傾向を示す。(論文1,9,学会発表5)

(3)LCE のソフト弾性は、(2)の「の向きが変化すると形が変形する」過程の逆の「物体を変形させるとの向きが変化する」という過程において観測される興味深い現象である。初めに、このような現象が2次元のFGモデルで起こり得ることを示した(論文5)。3次元 LCE の場合には、機械的な外力と変形量の関係を表わす「応力ひずみ曲線」は、水平部をもつ特徴的な形であるため「ソフト弾性」と呼ばれている。このソフト弾性に関しても、(2)の3DFGモデルは、実験結果と首尾一貫した結果を与える(論文1,学会発表5)。実際、3DFGモデルでは、ネマチック相にある LCE において、外力による変形量が小さい

時に外力の方向と垂直な状態にある は、外力が大きくなってくると、次第に外力の方向に傾いていき、最終的には、全ての がほぼ外力の向きに揃う。このような、内部自由度の構造変化がFGモデルでも起こり、しかも、この構造変化に伴って、外力の増加なしに変形が進む「(応力-ひずみ線図)のPlateau部」現象も起こる。さらに、構造変化が起こる前と起こった後は、外力と変位が比例する。つまり、3DFGモデルは実際に起こっている現象をよく再現する。(論文1, 学会発表5)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計10件)

1. Keita Osari, Hiroshi Koibuchi, Finsler geometry modeling and Monte Carlo study of 3D liquid crystal elastomer, *Polymer* 114 (2017) pp.355-369.
DOI: 10.1016/j.polymer.2017.02.065
2. Satoshi Usui, Hiroshi Koibuchi, Finsler geometry modelling of phase separation in multi-component membranes, *Polymers*, 8 (2016) 284(1-18).
DOI:10.3390/polym8080284
3. Hiroshi Koibuchi, Dependence of the surface tension on the shape of surface boundary, *Physics Letters A*, 380 (2016) pp.878-881.
DOI: 10.1016/j.physleta.2015.12.036
4. H.Koibuchi, A.Shobukhov and H.Sekino, Surface tension and Laplace pressure in triangulated surface models for membranes without fixed boundary, *Journal of Mathematical Chemistry*, 54 (2016) pp.358-374.
DOI: 10.1007/s10910-015-0564-9
5. Hiroshi Koibuchi, Andrey Shobukhov, Internal phase transition induced by external forces in Finsler geometric model for membranes, *International Journal of Modern Physics C*, 27 (2016) 1650042(1-15).
DOI: 10.1142/S012918311650042X
6. Satoshi Usui and Hiroshi Koibuchi, Parallel tempering Monte Carlo simulations of spherical fixed-connectivity model for polymerized membranes, *Journal of Statistical Physics*, 162 (2016) pp.701-711.
DOI: 10.1007/s10955-015-1428-1
7. Hiroshi Koibuchi, Finsler geometry modeling for elongation of flexible materials under external electromagnetic field, *FERROELECTRICS*, (IWMN 2016 proceedings), 508 (2017) pp.144-150.
DOI: 10.1080/00150193.2017.1289765
8. Satoshi Usui and Hiroshi Koibuchi, Phase Separation and Domain Formation in Multi-Component Membranes: Finsler

Geometry Modeling and Monte Carlo Simulations, MATEC Web of Conferences, Proceedings (CDROM), 2016 7th International Conference on Mechanical, Industrial. and Manufacturing Technologies, 54 (2016) 01002(1-5).

DOI: 10.1051/mateconf/20165401002

9. Hiroshi Koibuchi, Andrey Shobukhov, A Finsler Geometry Modeling of the Liquid Crystal Elastomer, *Journal of Physics: Conference Series*, 633 (2015) 012046(1-4).
DOI: 10.1088/1742-6596/633/1/012046
10. Hiroshi Koibuchi, Andrey Shobukhov, Surface Tension, Pressure Difference and Laplace Formula for Membranes, *Journal of Physics: Conference Series*, 574 (2015) 012101(1-4).
DOI: 10.1088/1742-6596/574/1/012101

[学会発表](計6件)

1. Hiroshi Koibuchi, Finsler geometry modeling of liquid crystal elastomers: bending under light illumination, EMN Polymer 2017, 2017年3月16日, Auckland, New Zealand.
2. Hiroshi Koibuchi, Finsler geometry modeling for elongation of flexible materials under external magnetic field, IWMN 2016: Second International Workshop "Modern Nanotechnologies", 2016年8月29日, Ekaterinburg, Russia.
3. Hiroshi Koibuchi, A glass phase in Finsler XY model and in fluid surface model for membranes, *Physics of Liquid Matter: Modern Problems*, 2016年5月28日, Kiev, Ukraine.
4. Hiroshi Koibuchi, A new surface model for two-component membranes, XIV International Workshop on Complex Systems, 2015年3月24日, Trento, Italy.
5. Hiroshi Koibuchi, A Finsler Geometry Modeling of the Liquid Crystal Elastomer, IC-Msquare 2015, 2015年6月6日, Mikonos island, Greece.
6. Hiroshi Koibuchi, Surface Tension, Pressure Difference and Laplace Formula for Membranes, IC-Msquare 2014, 2014年8月29日, Madrid, Spain.

[図書](計0件)

[産業財産権]

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

[その他]ホームページ等

6 . 研究組織

(1)研究代表者

鯉淵 弘資 (KOIBUCHI, Hiroshi)
茨城工業高等専門学校・機械システム工学
科・教授
研究者番号 : 00178196

(2)研究分担者 () 研究者番号 :

(3)連携研究者 () 研究者番号 :

(4)研究協力者 ()