

平成 29 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2016

課題番号：26610110

研究課題名(和文) 振動場と弾性場のカップリングによるソフトマターのシミュレーション手法の開発

研究課題名(英文) Simulation techniques for soft matter by coupling between oscillation and elastic fields

研究代表者

川勝 年洋 (KAWAKATSU, TOSHIHIRO)

東北大学・理学研究科・教授

研究者番号：20214596

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：架橋構造を持つ高分子ネットワークのミクロな構造や粘弾性特性を、分子モデルおよび場のモデルを用いて表現し、化学反応による内的な自励振動や外部から印加した変形・流動によって引き起こされる架橋高分子の変形挙動を解析した。架橋高分子を弾性体として扱い、化学反応のモデルを埋め込むことで、架橋高分子と化学振動とのカップリングによる振動変形挙動をシミュレートする方法論を確立した。また、生体繊維を構成する高分子を対象として、実際の分子構造の情報から架橋構造を作成し、この架橋構造に対して分子シミュレーションを実施し、架橋構造の弾性特性を明らかにすることができた。

研究成果の概要(英文)：Microscopic structures and viscoelastic behavior of network polymers are expressed in terms of molecular models and field models. These models are simulated in order to analyze their deformations due to internal chemical oscillations or externally imposed deformation and flow.

By combining a model of elastic network of polymers with an embedded chemical reaction, we developed a simulation technique for the oscillatory deformations of polymer networks induced by the reaction. We also developed a molecular model for biopolymers that compose biological fibers, and performed simulations on its elastic properties.

研究分野：ソフトマター物理学

キーワード：振動現象 弾性体 ソフトマター

1. 研究開始当初の背景

外力の効果によって引き起こされる高分子ネットワークの変形のダイナミクスは、潤滑効果や高分子アクチュエータなど広い工学的な応用の可能性を有しているのみならず、生体組織を構成する繊維構造の理解のためにも有用である。このような観点から高分子ネットワークを見るとき、ネットワークの粘弾性挙動と、外部から印加された刺激の関係性を明らかにすることが必要となる。特に、高分子ネットワークを自律分散ロボット等の自律的なエージェントの集団を駆動するアクチュエータとして使用する場合には、これらのエージェントを駆動する外力にも自律性を持つことが望まれる。このような自律性を持つネットワークとして代表的なものとして生体を構成する繊維構造を挙げることができるため、そのミクロな弾性挙動はアクチュエータ設計の指針を与えてくれると思われる。

2. 研究の目的

生体の運動を模したソフトマター系のモデルとして、架橋構造を持つ高分子ネットワークのミクロな構造やマクロな粘弾性特性を、分子モデルおよび場のモデルを用いて表現し、化学反応による内的な自励振動や外部から印加した変形・流動によって引き起こされる架橋高分子の変形挙動をミクロな分子シミュレーション、メソスケールの自己無撞着場理論によるシミュレーションおよびマクロな弾性体/流体シミュレーションを用いて解析する。

3. 研究の方法

ミクロな分子モデルとしては、生体高分子のアミノ酸配列の情報を用いて、粗視化分子モデルを生成し、モンテカルロ法による平衡構造の生成と変形を印加した時の応答特性を

調べる。また、高分子のネットワーク構造を記述できる自己無撞着場理論(SCFT)を開発することで、高分子のアミノ酸配列に対応した架橋構造体の弾性特性を予測することのできる理論体系の構築を目指す。

一方で、マクロな弾性/流体理論を用いて高分子ネットワークの粘弾性特性のシミュレーションを行う方法論を確立する。用いる方法としては、流体/弾性体を流体粒子で表現する Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)法と、空間に固定されたメッシュを用いる有限差分法を採用する。このような弾性体のモデルに対して、自励振動を伴う化学反応を導入し、あるいは外部から変形応力を印加することで高分子ネットワークを駆動し、その変形挙動を研究する。

4. 研究成果

生体繊維を構成する高分子を対象として、実際の分子構造の情報(アミノ酸の配列)から粗視化分子モデルを構築し、この分子に対する架橋構造をモンテカルロ法で作成した。生体繊維を記述する粗視化モデルとしては、繊維の軸となる硬質のコア領域とそれを取り巻く柔らかいアモルファス領域のそれぞれに対応する2種類のサイズの粒子を導入し、繊維構造を再現した。さらに、この系に外部応力を印加することで、繊維の弾性率を測定し、含水率の依存性など実験と矛盾しない結果を得ることに成功した。

また、この同じ生体分子の構成するネットワーク構造に対して SCFT を用いた定式化も試みた。この手法は、従来の非架橋の SCFT に対して、平均場近似の方法を用いて架橋構造を確率的に導入する方法であるが、SCFT の繰り返し計算の際に計算スキームの不安定が生じ、架橋高分子のネットワーク構造とその粘弾性特性を再現することには成功しなかった。

上記のミクロなモデリングと並行して、架

橋高分子を弾性体/流体として表現するマクロなモデルも構築した。ここでは、架橋高分子のネットワークは、SPH 粒子上あるいは空間に固定されたメッシュ点上に配置され、高分子の局所濃度分布に応じた弾性率が与えられるものとする。この系に、自励振動を起こす化学反応のモデルを埋め込むことで、系の浸透圧を周期的に変動させ、その結果誘起された架橋高分子の体積相転移によって架橋高分子の含水率が変化し、架橋高分子の変形が生じるというモデルを考える。SPH 法および有限差分法を併用することで、架橋高分子の体積相転移と化学振動とのカップリングによる架橋高分子の振動変形挙動をシミュレートする方法論を確立し、シミュレーションプログラムを開発した。シミュレーションの結果、化学振動が伝播することによる架橋高分子の脈動運動をよく再現でき、含水率の変化や化学振動を生じさせる成分の濃度変化などの種々の効果を取り入れた実現象の再現が可能であることが確認できた。さらに、上記と同様の SPH 法を用いた高分子濃厚系のモデルに対して、外力による変形とボイドの生成過程をシミュレートできる方法論を考案し、高分子膜の引きはがし挙動における膜の破壊現象のシミュレーションを行った。ボイドの生成においては、高分子成分と外部の気相との間の自由界面の形成が重要な因子となるが、SPH 法においては、そのような自由界面の扱いが非常に難しく、従来法を大幅に拡張することでこの困難を克服した。

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)

[学会発表](計 15 件)

Toshihiro Kawakatsu, "Dynamics of dense polymer blends and blockcopolymer systems" (招待講演), CECAM Workshop on "Multiscale Simulation Methods for Soft Matter Systems", 2016 年 10 月 6 日、

Technische Universitaet (Darmstadt, Germany).

高畑正一, 川勝年洋, 「自律振動ゲルの連続体モデル」, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2016 年 9 月 15 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市).

Toshihiro Kawakatsu, "Phase separation dynamics of polymer blends and blockcopolymer systems" (招待講演), The A3 mini-Workshop on Soft matter, 2016 年 3 月 23 日, 北京航空航天大学 (Beijing, China).

関根 忍, 川勝年洋, 「粒子法をもちいた粘弾性体の引っ張り挙動解析」, 第 5 回ソフトマター研究会, 2015 年 12 月 18 日, 東北大学青葉山キャンパス・青葉サイエンスホール (宮城県仙台市).

高畑 正一, 川勝年洋, 「自律振動ゲルの理論・数値計算モデル」, 第 5 回ソフトマター研究会, 2015 年 12 月 18 日, 東北大学青葉山キャンパス・青葉サイエンスホール (宮城県仙台市).

高畑正一, 川勝年洋, 「化学反応下での自励振動ゲルの理論・数値計算モデル」, 計算統計物理学研究会 第 6 回研究会 (The 6th Workshop on Computational and Statistical Physics), 2015 年 11 月 21 日, 名古屋大学 ES ホール (愛知県名古屋市).

遠藤 謙光, 川勝年洋, Florian Mueller-Plathe, 「ヤモリの剛毛のメソ構造と力学特性」, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16 日, 関西大学・千里山キャンパス (大阪府吹田市).

Toshihiro Kawakatsu, "Dynamic Self-Consistent Field Theory for Entangled Polymer Systems", Lorentz Center Workshop on "The Future of Multi-Scale Soft Matter Modeling", 2015 年 9 月 3 日, Lorentz Center, Leiden University (Leiden, The Netherlands).

Toshihiro Kawakatsu, "Coarse-grained structures and dynamics of amphiphilic systems" (招待講演), KITPC/ITP-CAS Workshop on "Controlled Structural Formation of Soft Matter", 2015 年 8 月 7 日, Kavli Institute of Theoretical Physics China (Beijing, China).

関根忍、川勝年洋、「SPH法を用いた粘着材剥離過程のシミュレーション」、第28回分子シミュレーション討論会、2014年11月12日、仙台市民会館(宮城県仙台市)。

高畑正一、川勝年洋、「化学反応とカップルしたゲルの動力学 -連続体力学によるモデリング-」、第28回分子シミュレーション討論会、2014年11月13日、仙台市民会館(宮城県仙台市)。

遠藤謙光、川勝年洋、「自己無撞着場理論を用いた架橋ポリマーネットワークの力学応答の研究」、日本物理学会2014年秋期大会、2014年9月8日、中部大学・春日井キャンパス(愛知県春日井市)

高畑正一、川勝年洋
「化学反応の自励振動に誘起されるゲルの大変形のモデリング」、日本物理学会2014年秋期大会、2014年9月8日(月)、中部大学・春日井キャンパス(愛知県春日井市)

Toshihiro Kawakatsu, "Field theories for shape deformations of vesicles" (招待講演), Main-Symposium of "computational condensed matter: advances and challenges (CompMat2014)", 2014年9月9日, Westlakes Science & Technology Park, (Whitehaven, The Lake District, UK).

Toshihiro Kawakatsu, "Hybrid field theories for complex domains in polymer/membrane systems" (招待講演), Pre-Symposium of "computational condensed matter: advances and challenges (CompMat2014)", 2014年9月7日, Westlakes Science & Technology Park, (Whitehaven, The Lake District, UK).

[その他]

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川勝 年洋 (KAWAKATSU, Toshiohiro)
東北大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号: 20214596

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

森井 洋平 (MORII, Youhei)

東北大学・大学院理学研究科・産学官
連携研究員