

ソフトマターにおける連鎖構造・ネットワーク構造のダイナミクスとレオロジー

山形大学大学院理工学研究科・教授 滝本淳一

成果概要

ソフトマター中の連鎖構造として(1)会合性高分子の作る動的ネットワーク、(2)絡みあい高分子、(3)環動ゲル（特に非線形弾性）、(4)平板・棒状状液晶分子が流動下で作る非平衡構造、(5)脂質膜の変形ダイナミクス、などを取り上げ、シミュレーション手法の開発とその適用を行っている。(1)では分子鎖あたりの会合数が大きい場合にラウス型緩和が現れることを見いだした。(5)は A02 班今井グループとの共同研究で、ベシクルに開いた穴に関し実験で見いだされた特異な構造の起源を明らかにしている。(3)は A01 班伊藤・浦山らの実験結果に触発されたものであるが、理想的な環動ゲルのモデルでは実験を再現せず、現実の環動ゲルにおける未知の要員の存在を示唆する。

1. 会合性高分子の動的ネットワーク(印出井・滝本)

分子鎖中に複数の会合部位を持つ会合性高分子は、その重要性に比べこれまでの定量的研究は少ない。我々は一本鎖モデルの範囲で各会合状態毎の部分鎖の分布関数の時間発展方程式を定式化し、線形粘弾性に適用した。その結果、一分子鎖中で会合している会合部位の平均個数 N が小さい場合はテレケリックの場合と同様 Maxwell モデルと良く一致し、 N が大きくなるとさらに低周波側にラウス型の緩和が現れることなどを見いだした（右図は、平坦部弾性率の低い方から順に会合部位数=2,3,5,9,17,33 の場合の計算結果）。このラウス型緩和は、 N 個の会合部位が一個ずつ解放・再会合を繰り返すことを素過程とするもので、その緩和時間（図中 τ_A ）は N の二乗に比例する。

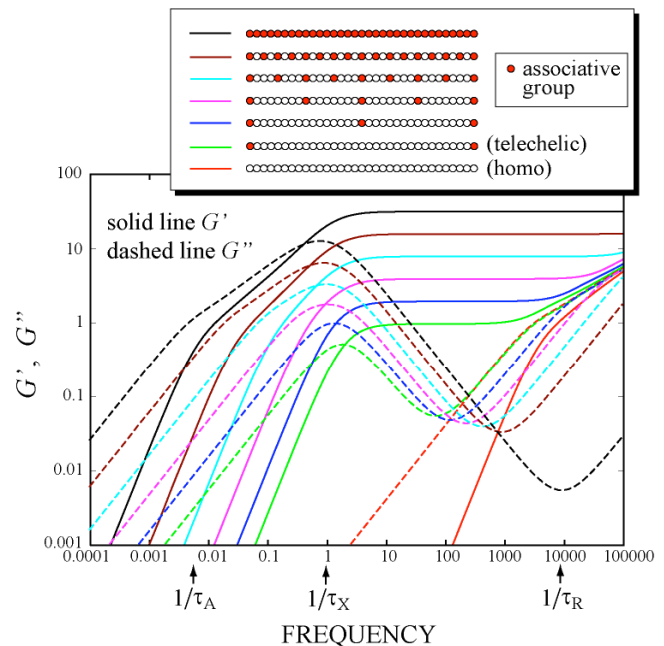


Figure : Normalized dynamic shear moduli vs. frequency divided by dissociation rate

2. 斥力みの平板分子系：棒状分子系への展開 (香田)

ずり流動が平板分子系に与える影響を調べる目的で開発したプログラムを用いて、棒状分子系の液晶がずり流動から受ける影響を調べた。ずり流動は、アフィン変形を誘導するポテンシャル場により発生させ、シミュレーションにはモンテカルロ法を用いた。このシミュレーションにより、流動誘起の等方-ネマチック相転移が確認できた。また、流動時にネマチック秩序が現れる際に、流動方向と配向ベクトルの間に現れる、流動配向角と呼ばれる角度

を分子的に確認する事ができた。この他、電荷移動錯体を形成する液晶系で見られる誘電率などの異常性に関する実験結果と、それを説明するためのイオン会合の理論に関する論文を公表した[1]。

3. 多成分脂質膜の変形ダイナミクス：穴あきベシクル（谷口）

近年、膜面内部の自由度が膜変形に及ぼす影響に興味注がれ、多くの研究者がそのような観点から研究を進めている。A02 班の今井グループでは多成分ベシクルの変形ダイナミクスの実験研究が進められている。本研究は、今井グループとの共同研究であり、同グループで得られた実験成果を理論・シミュレーションの観点から調べ、より深いレベルで現象を理解することを目的している。最近、DHPC と DPPC の二成分ベシクル系において、2 つの成分がよく混ざった一相状態から温度を降下させる際に生じる構成脂質のアルキル鎖の主転移と関連して、膜に自発的な pore(穴)が形成されることが今井グループから報告された。また、この系の pore 形成は、タンパク等を用いた従来の pore 形成とは異なり、「pore が DHPC 分子により安定化されること」、「脂質の平均組成が、ある領域にあるとき、pore 周辺の膜が roll 状の構造を形成する」ということが特徴的である。本研究では、この pore 周辺に形成される roll 状の膜構造の起源を探るため、従来の膜のモデルを拡張した理論モデルを考案し、数値計算を行った。今迄の成果として、1 つの穴をもった軸対称ベシクルが、条件が揃うと、下図に示すように、単純な pore を持った球形のベシクルから pore 周辺に roll 状の構造を持つベシクルへ変化することがわかった。この計算結果から、pore の周辺部にある膜の縁を通した内外膜間の DHPC 分子の輸送と pore の縁周辺部の内外膜の局所組成差により生じる自発曲率が、roll 状構造の起源であることが分かった。

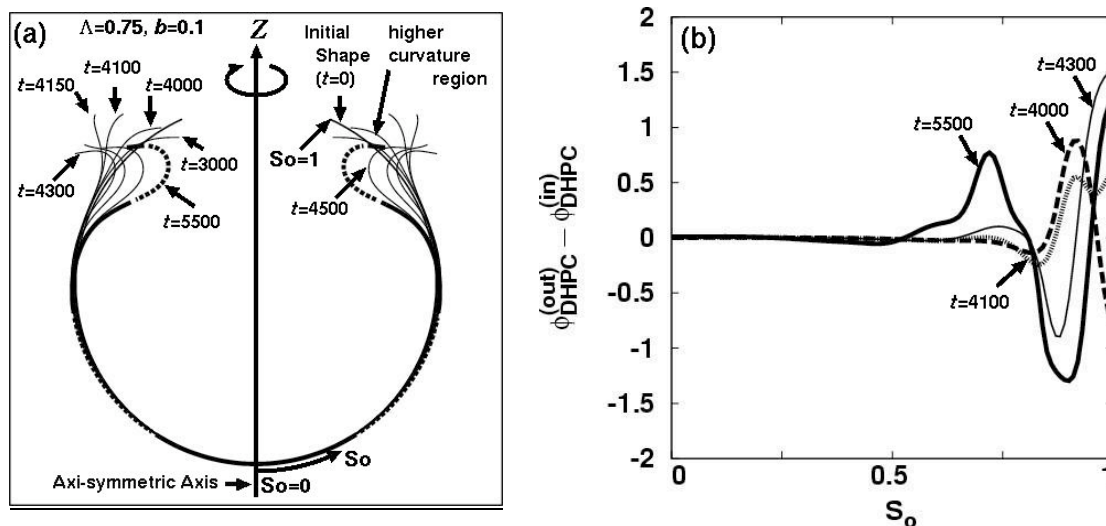


図 軸対称ベシクルの形の時間発展(a)の様子。そのベシクルの濃度差分布の時間発展の様子(b)。pore の縁付近で内外膜の DHPC 濃度差が生じている。

<参考文献>

[1] T. Koda, T. Mitsuyoshi, A. Kanazawa, A. Nishioka, K. Miyata, G. Murasawa, S. Ikeda, T. Miura, and Y. Kimura: J. J. Appl. Phys. **48**(2009)121404.