藤原　進 教授

お問合せ先
corc@kit.ac.jp
産学公連携推進センター

■キーワード
分子シミュレーション　高分子材料　構造形成

高分子構造形成のシミュレーション研究
分子シミュレーションによる高分子材料開発の効率化

■研究の概要

高分子や両親媒性分子などのソフトマターは、構造制御の工夫により多種多様な物性を発現する新規材料として期待される物質です。高度な機能を有する高分子を効率的に開発するには、その機能発現を可能にする高次構造を制御することが必要です。そのため、高分子構造形成機構の解明と、それを応用した高次構造制御法の開発は非常に重要な課題です。また、両親媒性分子の自己会合機構の微視的理解は学術的に意義が大きいだけでなく、量子ドットの生体適合化や脂質二分子膜ベシクルによる新規ドラッグ・デリバリー・システムの構築など、応用技術的意義も大きいと考えられます。

私たちは、ソフトマター系における構造形成機構を分子レベルで解明し新規材料の創出に寄与するため、高分子や両親媒性分子の分子シミュレーション研究に取り組んでいます。また、ソフトマター系における構造形成機構の解明を通して、様々な系に普遍的に存在する非線形法則を探求するという基礎科学研究も行っています。

■研究・技術のプロセス／研究事例

私たちはこれまで、様々なソフトマター系の構造形成に関する分子動力学シミュレーション・コードを開発し、シミュレーション研究を行ってきました。具体的には、

（1）孤立した一本の高分子鎖の構造形成（図１）
（2）孤立した短い鎖状分子の構造形成（図２）
（3）溶液中における高分子鎖の構造形成
（4）末端帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化（図３）
（5）直鎖アルカンの表面固化
（6）両親媒性分子の構造形成
（7）脂質膜の相転移

などのシミュレーションを実行し、構造形成過程の詳細な微視的解析を行ってきました。特に、高温においてランダムな配位にある分子を冷却することにより、いかにして秩序構造が形成されるのかという問題に取り組んできました。

高分子構造形成のシミュレーション研究から、初期に自由エネルギー的に高い非平衡状態から出発して、系が不連続的に自由エネルギー極小状態に緩和していくという知見を得ました。このような不連続的自由エネルギー緩和は、粒子間相互作用の全く異なる系であるプラズマ系においても見出されており、個々の要素間相互作用の形に依存しない普遍的な現象であるといえます。このように、本研究は、様々な系に普遍的に存在する非線形法則を探る上で、大きな手掛かりを与えるものです。

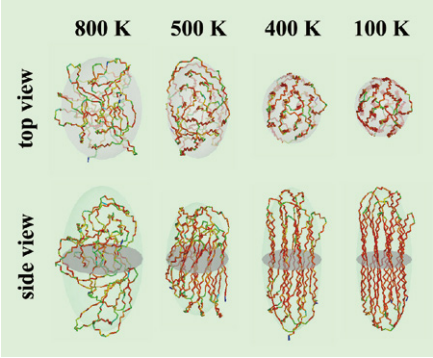

図１：孤立した一本の高分子鎖の構造形成に関する分子動力学シミュレーション。高温においてランダムな配位の高分子鎖（左）を段階的に冷却することにより、最終的に折り畳まれた配向秩序構造が形成されます（右）。色は二面角の大きさを表します。

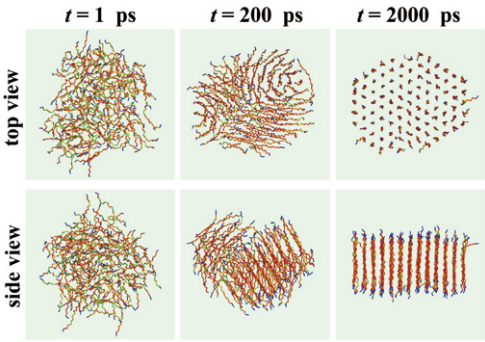

図２：孤立した短い鎖状分子の構造形成に関する分子動力学シミュレーション。高温においてランダムな方向を向いている鎖状分子（左）を冷却することにより、先ず局所配向秩序領域が成長を始めます（中央）。それらが合体することにより、最終的に一つの配向秩序構造が形成されます（右）。色は二面角の大きさを表します。

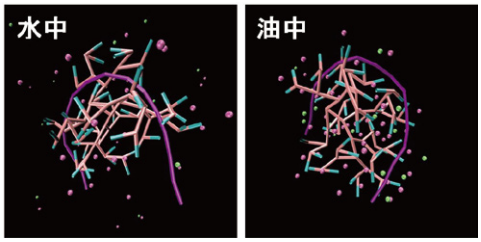

図３：末端帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化に関する粗視化分子動力学シミュレーション。溶媒が水の場合、高分子電解質はデンドリマー内部に入り込みます（左）。それに対して、溶媒が油の場合、高分子電解質はデンドリマーの周囲を取り囲みます（右）。また、溶媒が水の場合と油の場合とで、対イオンの凝集様式にも違いが表れます。可視化のため、溶媒は表示していません。

■セールスポイント

材料開発・材料研究の分野において、分子シミュレーションの重要性はますます高まっています。分子シミュレーションを行う際の分子モデルの構築方法や分子シミュレーション手法などについて、気軽にご相談ください。