



## ■キーワード

ソフトマター 分子シミュレーション レオロジー 自己集合

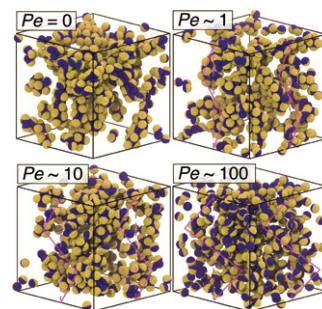
## ■研究の概要

ソフトマターは高分子やコロイド、界面活性剤などの柔らかい物質の総称であり、ゴムタイヤ、塗料、化粧品、液晶テレビ、日常のあらゆる生活用品、生体物質など様々なものへ使用されており、機能性材料の宝庫として注目されています。ソフトマター系において、発現する物性やその発現メカニズムを知るためには、ミクロ(どのような原子・分子で構成されているか?)とマクロ(物性)の情報に加え、流体内部の構成要素がどのように分散または凝集するのかというメソスケールの情報も重要となります。しかし、実験の側面からは流体内部の分子集合体を正確に直接観察することは簡単ではなく、さらに外力によって、変形・破壊・再生成を行うため、例えばせん断下や熱勾配下での観察はより困難なものとなる上、再現性の問題も抱えることとなります。このような問題に対して、粗視化分子シミュレーションを用い、分子のデザイン(ナノスケール)－自己集合・分散構造(メソスケール)－物性(マクロスケール)を接続することで、物性発現メカニズムを分子レベルで明らかにすることを目的として研究に取り組んでいます。

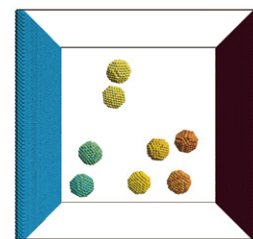
## ■研究・技術のプロセス／研究事例

近年の合成技術の発達により、1つの粒子の中に2つ以上の異なる表面を有する異方性(ヤヌス)粒子の作製が可能となりました。この十数年で実験・シミュレーション問わず、ヤヌス粒子系ではその表面異方性に起因する様々な複雑な自己集合過程や構造が確認されているにも関わらず、その複雑な自己集合構造と物性の関係性は明らかになっていませんでした。本研究では粗視化分子シミュレーション法のひとつである多粒子衝突動力学法と分子動力学法を組み合わせたハイブリッドシミュレーションを用い、静止場におけるヤヌス粒子分散液の自己集合構造、さらにせん断流れ下において分散液が示す粘性挙動と自己集合構造との間にどのような関係性があるかについて調べました。最も基本的なジブロック(半球が疎水表面に覆われている)ヤヌス粒子モデルを使用し、ヤヌス粒子のデザインや体積分率に応じて現れる様々な自己集合(平衡)構造にせん断流れを与えたところ、ある速さを超えたとき、せん断速度が増すにつれて粘度が低下するShear-thinning現象がクラスターの崩壊とともに現れることが分かりました。また興味深いことに、コロイド分散液の粘性挙動はクラスターのサイズ(平均会合数)で整理可能であることを見出しました。

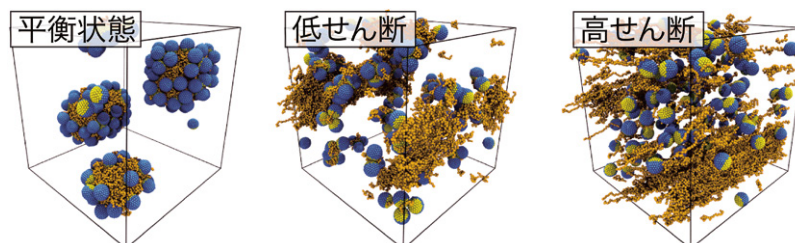
他にも、コロイド・ポリマー混合溶液の粘性挙動、ナノ粒子分散液の熱伝導等の解析も行っています。



せん断流れ下におけるヤヌス粒子の自己集合構造



温度勾配下におけるナノ流体



せん断流れ下におけるヤヌスコロイド・ポリマー混合溶液の自己集合構造

## ■セールスポイント

粗視化分子シミュレーションを駆使することで、実験で観測される事象の分子論的理解を深め、分子論に基づいたソフトマター材料開発へ貢献していきたいと考えています。

物性発現と階層構造の関係性の解明を目指す  
ソフトマター材料設計への分子シミュレーションの応用