

機械的アニールを施した高密度粒子系における Shear Jamming と Shear Melting

(名大理) 川崎猛史, 宮崎州正

【はじめに】

熱運動が無視できるほどの比較的サイズの大きな粒子を充填させると、ジャミング転移密度 ϕ_J を境に、系は剛性をもち、固体的になる。特に、 ϕ_J 近傍においては、系の弾性率、圧力、降伏応力などの様々な力学変数において臨界的振る舞いが見られ、そこでの力学応答は非線形かつ極めて複雑になる(1)。一方、ジャミング転移密度 ϕ_J は、系の生成プロトコルに強く依存することが知られている。特に、系を熱ゆらぎや機械変形にさらず、「熱的アニール」(2)や「機械的アニール」(3)により、 ϕ_J を系統的に変化させることができる。他方、 ϕ_J 近傍で見られる力学変数の臨界性、また非線形な力学応答が、系のアニールの度合いに対してどの様に依存するかについて、十分な理解は得られていない。本研究の目的は、高密度分散系に対してアニールを施すことにより、 ϕ_J を系統的に変化させ、そこでの力学応答の詳細を明らかにすることである。

【結果と考察】

本研究では一貫して、FIRE 法と呼ばれるエネルギー最適化手法 (4)を用い、準静的過程における多粒子系の数値計算を行った。粒子の初期構造は、周期的体積変形（機械的アニール）施したものをを用いた。特に、低密度のランダム構造から密度 ϕ_{MAX} まで圧縮し、その後、系の体積を膨張させ、エネルギーがゼロとなる密度を ϕ_{J0} とした。すると、 ϕ_{MAX} の大きさ（機械的アニールの度合い）に応じて、 ϕ_{J0} が系統的に変化することを確認した。次に、機械的アニールの度合いを変化させた系において、各ジャミング転移点 ϕ_{J0} から密度を $\delta\phi$ 変化させ、一様剪断を準静的に掛けた際の系の力学応答を調べた。その結果、剪断変形により剛性を獲得する Shear Jamming、またその逆に、剪断変形により剛性を消失する Shear Melting が、機械的アニールの度合い ϕ_{MAX} や、ジャミング転移点からの距離 $\delta\phi$ の大きさに応じて、それぞれ観測されることを見出した。このことは、剪断を掛けることにより、初期構造の記憶が失われ、ジャミング転移密度の値が ϕ_{J0} から ϕ_{JS} へ変化することが主な要因であることを本研究では明らかにした。ここで、 ϕ_{JS} は十分大きなシアを与えた系におけるジャミング転移密度である。

本公演では、このような機械的アニールの度合いに対して系統的に依存する、Shear Jamming や Shear Melting をはじめとする非線形力学応答の詳細について議論する予定である。

【参考文献】

- (1) J. Boschan, D. Vagberg, E. Somfai, and B. P. Tighe, *Soft Matter* **12**, 5450 (2016).
- (2) M. Ozawa, T. Kuroiwa, A. Ikeda, and K. Miyazaki, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 205701 (2012).
- (3) N. Kumar and S. Luding, *Granular Matter* **18**, 58 (2016).
- (4) E. Bitzek, et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170201 (2006).

高分子ガラスにおけるボゾンピークに潜んだ普遍性： デバイ理論と弾性力学に基づく振動状態密度のスケーリング

(阪大院基礎工* 東大総合文化** 筑波大数物***)

友重直也*, 水野英如**, 金鋼*, 森龍也***, 松林伸幸*

【はじめに】

固体は、規則的な配置を持つ結晶と、不規則な配置を持つガラスの2種類に分類することができる。結晶における比熱や熱伝導度などの熱的性質はデバイ理論で予測される振る舞いをするが、ガラスの熱的性質は結晶と異なった振る舞いを示すことが知られている。このようなガラスの熱的性質の振る舞いは振動状態密度が低周波数領域にデバイ理論で予測されるよりも過剰な振動モードであるボゾンピークを持つことに起因するとされている(1)。これまで、分子動力学シミュレーションを用いた、ガラスの振動特性・力学的特性の研究が勢力的に行われてきた。特に、レナード・ジョーンズ (LJ) 粒子系のような簡単なガラスモデルである単原子ガラスを用いた理論研究が主に行われている (2)。近年、金属ガラス・高分子ガラスについての、より現実系に近い分子動力学シミュレーションにより、実験事実と理論予測を結びつけることが希求されている。本研究では、高分子ガラスについて振動状態密度解析を行い、鎖長・鎖の剛性依存性を調べた。

【結果と考察】

本研究では、代表的な粗視化高分子モデルである **Kremer-Grest** モデルを採用し、鎖長 $L = 3, 50$ の高分子鎖について振動状態密度解析を行い、デバイ理論との比較をおこなった。デバイ理論では、低周波領域の振動状態密度が $g(\omega) = A_D \omega^2$ (A_D : デバイレベル) となると予測されるが、**Fig.1(左)**では過剰なピーク(ボゾンピーク)がみられる。また、**Fig.1(右)**から、このボゾンピークがデバイレベルによりスケールできることが明らかとなった。さらに、デバイレベルの要素である、体積弾性係数・剪断弾性係数についての解析から体積弾性係数に比べて剪断弾性係数が遥かに小さいため、ボゾンピークを支配するのは剪断弾性係数であるということを見出した。詳細は講演にて発表する(3)。

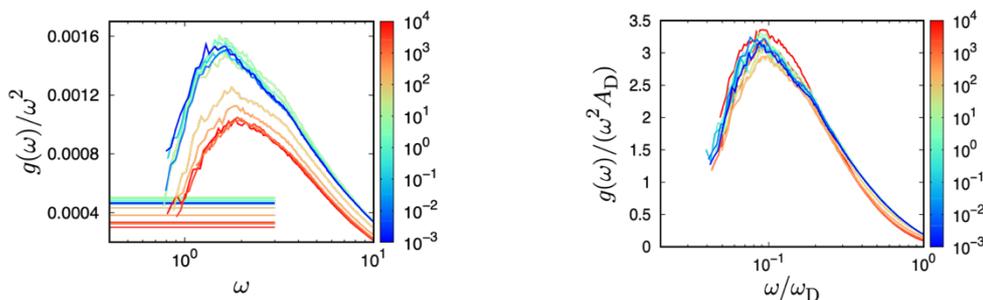


Fig.1 (Left) Low-frequency vibrational spectra for various bending rigidity. We plot the vDOS divided by ω^2 . The horizontal lines indicate the Debye level. The chain length is $L = 50$. (right) Scaled vibrational spectra for various bending rigidity in the scaled form: we scale the reduced vDOS $g(\omega)/\omega^2$ and the frequency ω by the Debye level A_D and the Debye frequency ω_D . The scaled vDOSs nicely collapse for different bending rigidity. The chain length is $L = 50$.

【参考文献】

- (1) U. Buchenau, N. Nücker, and A. J. Dianoux, Phys. Rev. Lett. 53, 2316 (1984).
- (2) M. Shimada, H. Mizuno, and A. Ikeda, Phys. Rev. E, 97, 022609 (2018).
- (3) N. Tomoshige, H. Mizuno, T. Mori, K. Kim, and N. Matubayasi, arXiv:1907.10899 (2019).

ペーストの記憶効果の2次元弾塑性モデル

(¹大阪大学, ²島根大学) 大槻 道夫¹, 森田 純平²

【はじめに】

水と粉を混ぜたペーストを薄い容器に入れて乾燥させる。通常は、表面にランダムな亀裂パターンが形成されるが、乾燥前に容器に振動による慣性力を加えるとペーストにその記憶が残り、加振の方向に対して垂直な縞状のパターンが形成されることがわかってきた⁽¹⁾。この記憶効果の理解のために、ペーストの塑性変形に着目した二つのモデルが提案されている。一つは線形弾性論に塑性を加えた準線形モデル⁽²⁾、もう一つは非線形弾性論に塑性を加えた非線形モデル⁽³⁾である。どちらのモデルも塑性変形由来の張力によって亀裂パターンに影響が出るのが予言されるが、そのパターンは準線形モデルでは非一様、非線形モデルでは一様といった違いが出る。実験では、周期的な加振の回数に応じて、どちらのパターンも発生することから⁽⁴⁾、記憶効果の理解には、両方の機構を内包したモデルの導入が必要となる。

【結果と考察】

この問題を解決するために、1次元に限定された非線形モデル⁽³⁾を、2次元的な塑性変形を扱えるよう拡張した。図1は2次元モデルで得られる残留応力分布を示している。左図は半周期だけ加振を加えた場合の残留応力場で、底付近では外力の方向によらず引っ張りの残留応力が発生する一方、上面で正負に分かれた非一様な場が形成されている。この非一様な残留応力場の影響で、準線形モデルと同様の非一様な亀裂パターンの形成が予想される。一方、右図は2周期の加振を加えた後の残留応力を示しており、右図と比較して上面の非一様性が減少しているため、亀裂パターンも一様になると予想される。これは実験⁽⁴⁾と整合的である。

【参考文献】

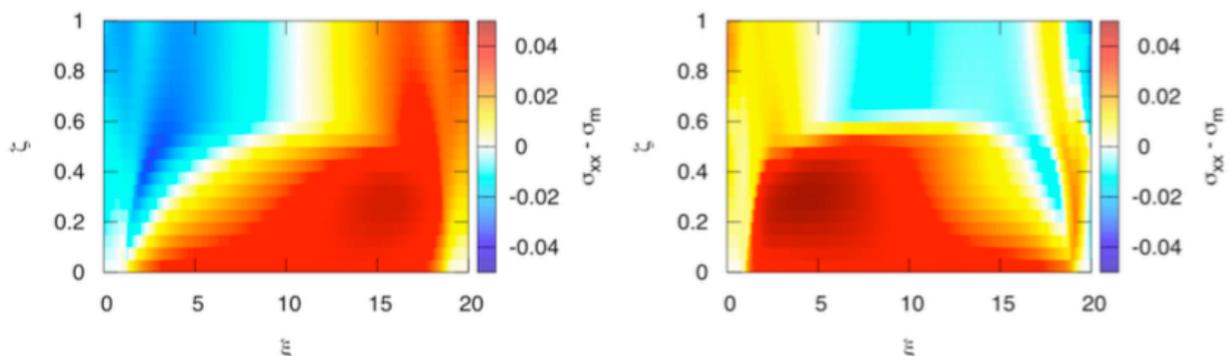


図1：半周期の加振後の残留応力（左）。2周期の加振後の残留応力（右）。

(1) 中原 明生, 松尾 洋介, 大信田 文志, 日本物理学会誌 70 (2015), pp.179-187.

(2) M. Otsuki, Phys. Rev. E 72, 046115 (2005).

(3) T. Ooshida, Phys. Rev. E 77, 061501 (2008).

(4) A. Nakahara, T. Hiraoka, R. Hayashi, Y. Matsuo and S. Kitsunozaki, Phil. Trans. R. Soc. A 377, 20170395 (2019)

脂質三成分ベシクルの膜粘度マップ

(東北大理, A京大工) 佐久間 由香, 川勝 年洋, 谷口 貴志 A, 今井 正幸

【はじめに】

細胞膜は脂質, タンパク質, 糖鎖など多数の分子から成る不均一膜である。細胞膜における代謝や信号伝達といった生体機能はリガンドとタンパク質の相互作用に誘起され、その相互作用はタンパク質の膜内流動によって制御されている。そこで、モデル生体膜にトレーサーを埋め込み、その動きから拡散係数を求めて理論モデルから膜流動の指標である膜粘度に変換するという研究が行われてきた。しかし、理論モデルにトレーサーのサイズと膜粘度の関係に制限があることや、均一の平面膜を仮定しているため曲率を持った不均一膜への適用が困難であるなどの問題があった。

これに対し、最近我々は Henle と Levine が提案した球状膜を仮定した流体モデルを元に [1]、不均一ベシクルにおいて広い膜組成の範囲で膜粘度を測定する手法を開発した。ベシクルの一点に接線方向の力を与えると膜に渦流れができ、この渦の中心位置は膜粘度によって変化する。そのため、渦の中心位置を測定することにより膜粘度を得ることができる。本研究ではマイクロインジェクションによる水流を用いて膜流動を誘起し、脂質三成分ベシクルの相分離によってできるドメインをトレーサーとすることで流動を可視化した。今回、三成分の組成比を様々に変えたときの膜粘度を相図上にマップし、膜組成と粘度の関係について調べた。

【結果と考察】

DPPC/DOPC/Cholesterol (CHOL)三成分ベシクルは、主に DPPC, CHOL から成る L_0 相と主に DOPC から成る L_d 相に相分離する。今回は 20°C で相分離した様々な組成比の DPPC/DOPC/CHOL 三成分ベシクルの膜面に流動を誘起し、渦の中心位置を測定することにより膜粘度を得た。この結果、膜粘度は $10^{-10}\sim 10^{-6}\text{Pa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}$ の広範囲に及び、 L_0 相の主成分である DPPC の比率が多いほど高粘度であることがわかった。また、相図中に引いたタイライン上の 7 点の膜粘度と L_d 相の面積分率 ϕ_{L_d} との関係を調べると、 $0.5\leq\phi_{L_d}<1$ では膜粘度はほぼ一定値で L_d 相の膜粘度が支配的であるのに対し、 $0<\phi_{L_d}\leq 0.5$ の範囲では膜粘度は ϕ_{L_d} の増加に対して指数関数的に減少していることがわかった。 $0<\phi_{L_d}\leq 0.5$ での膜粘度の ϕ_{L_d} 依存性を L_d , L_0 それぞれの相における脂質の活性化エネルギーの観点から考察した結果を報告する。

【参考文献】

(1) Henle and Levine, *Phys. Rev. E* **81**, 11905 (2010)

ガラス液体の協同性 -密度ゆらぎのダイナミクスからの探索-

(東大生産研) 古川 亮

【はじめに】液体をガラス転移点に向けて急冷すると、粘性係数は劇的に増大する。この劇的な粘性の増大そのものがガラス転移を定義付けるものであるが、そのメカニズムは今日においても十分に理解されていない。ガラスが長年の謎たる所以の1つは、「液体のようなランダムな構造」を持つにも関わらず「固体のような剛性」を示すという事実であろう。確かに、密度揺らぎはガラス化において、その静的性質をほとんど変えず、2体の相関関数を与える情報は、通常の液体のものと見分けがつかない。これは激変する粘性の振舞いと著しい対照をなす。そのため、(ガラス化に付随すると期待されている)熱力学異常や長距離相関を、密度揺らぎ以外の「隠れた何か」に求める研究が盛んに行われてきた。

では、本当に密度はガラス研究において“退屈な”観測量なのであるだろうか？

【結果と考察】特にフラジイルと称されるガラス形成液体に関する数値シミュレーション結果を基に、流体力学的な視点から解析・議論を展開した。以下に要点を列記する。

(i)密度揺らぎの緩和は、粒子(密度)の交換により進展し、それゆえ拡散的である。これは、(特にフラジイルと称される)ガラス形成液体の取りうるダイナミクス(動的経路)が、「局所的な保存則を満たす」という強い制限を受けたものであることを意味する。

(ii)密度揺らぎのダイナミクスには、ガラス化に伴う協同性の発現と成長が直接反映される：単純液体状態では、密度の交換プロセスは非協同的であり、密度揺らぎの拡散係数 D_c は

$$D_c \approx \frac{\lambda^2}{\tau_\alpha}$$

のように与えられる。ここで、 λ は粒子サイズ、 τ_α は構造緩和時間である。一方、過冷却度を上げるに従い、局所的な保存則が動的経路に課す制限はさらに強いものとなる。その結果、密度の交換プロセスはより協同的となるが、この場合、拡散係数は、

$$D_c \approx \frac{\xi_d^2}{\tau_\alpha}$$

のように与えられる。ここで、 ξ_d は交換プロセスに現れる協同長である。

(iii) 分子動力学シミュレーションの結果から、粒子の自己拡散係数 D_s と密度揺らぎの拡散係数 D_c は、同様の温度依存性を示すのみならず、定量的によく一致する($D_s \approx D_c$)。これは、粒子の自己拡散と密度の拡散が同じ交換プロセスに支配されていると考えることで、自然に理解されよう。ただし、単純液体状態では、粒子運動が流体モードを決定し、一方で、過冷却状態では、協同運動がそのサイズ以下の運動を支配する。

【参考文献】

- (1) A. Furukawa and H. Tanaka, 2012 *Phys. Rev. E* 86 030501(R).
- (2) A. Furukawa and H. Tanaka, 2016 *Phys. Rev. E* 94 052607.
- (3) A. Furukawa 2018 *Phys. Rev. E* 97 022615.
- (4) A. Furukawa *J. Stat. Mech.* (2019) 084001.

液晶滴内のマランゴニ対流が駆動する配向の自励振動

(立命館大理工) 吉岡 潤、深尾 浩次

【はじめに】 風による旗のはためき、BZ 反応、あるいは心臓の収縮、弛緩等に見られるような、非周期的な外力、エネルギーを取り込んで駆動される振動現象は自励振動と呼ばれる。自励振動は非平衡開放系において普遍的に観測される

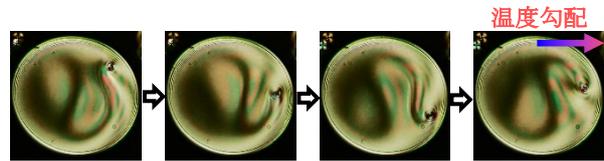


図 1: 温度勾配下の Ch 液晶滴における配向の自励振動 (時間間隔:4 秒、印加温度勾配: 30.9K/mm)

非線形現象であるが、一般にその機構は複雑であり、現象の力学的理解に困難を伴うことが多い。旗のはためき現象に着目すると、流動によって構造物(旗)が変形し、またその変形によって流動場が変化する、という複雑な相互作用が振動を誘起することが分かっており、計算科学的手法を用いてもこの現象の完全な再現は未だ難解な課題であるとされている。一方、液晶は構造を有しつつ流動する複雑流体であり、旗のはためきの事例と照らし合わせると、自励振動は液晶系においても得てして発生する現象であろうと考えられる。以前我々は、ネマチック(N)液晶が形成する滴(液晶滴)が液体中に分散した系において温度勾配を印加すると、マランゴニ対流が誘起されて配向場が変形することを発見した[1]。これに対して本研究では、コレステリック(Ch)液晶を用いて液晶滴を作製し、上記と同様の実験を行った。その結果、図 1 に示すように特定の条件下で配向が周期的に変形を繰り返す自励振動が誘起されることが判明した。

【結果と考察】 本研究では、Ch 相を示す液晶試料として、N 相を示す E8 にキラル添加剤 S811 (Merck 社)を 0.2wt.%混合したものを用いた。これとフッ素鎖系オリゴマー-PF656 (Omnova 社)を質量比 3:7 で混合し、サンドイッチセル内において円柱状の Ch 液晶滴が液体溶媒中に分散した系を作製した。上記の試料を偏光顕微鏡を用いて観察したところ、滴サイズが小さい場合は十字状の、大きい場合はねじれを伴った十字状の組織が観察された

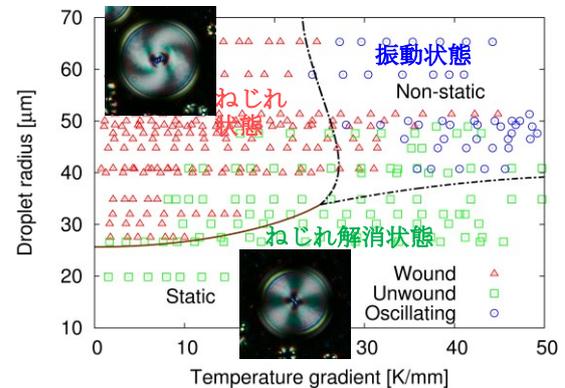


図 2:分岐図

(図 2 内挿図)。ここで、組織にねじれが生じている状態でセル基板に平行な方向に温度勾配を印加すると、滴サイズが比較的小さい場合はねじれが消失する一方、滴サイズが大きい場合は配向が静止している状態が不安定化し、図 1 に示すように配向場に自励振動が誘起されることが判明した。これらの観察結果をもとに、温度勾配と滴半径を軸として分岐図を作成すると図 2 が得られ、勾配と滴サイズをパラメータとして状態が遷移することが確認された。以上の現象は、温度勾配によって発生した流動と配向変形の相互作用によって誘起されていると考えられる。そこで我々は、流動場、配向場に対して単純化したモデルを設計し、オンサーガーの変分原理[2]を適用することで現象を記述することを試みた。詳細は発表で述べる。

【参考文献】 [1] J. Yoshioka and K. Fukao, Phys. Rev. E **99**, 022702 (2019) [2] M. Doi, J. Phys.: Condens. Matter. **23**, 284118 (2011)

ネマチック液晶中での蛍光異方性と色素分子形状の関係

(産総研) ○大園拓哉* 谷田部哲夫 (名大)ワン チェンガン・深澤愛子・山口茂弘

【はじめに】

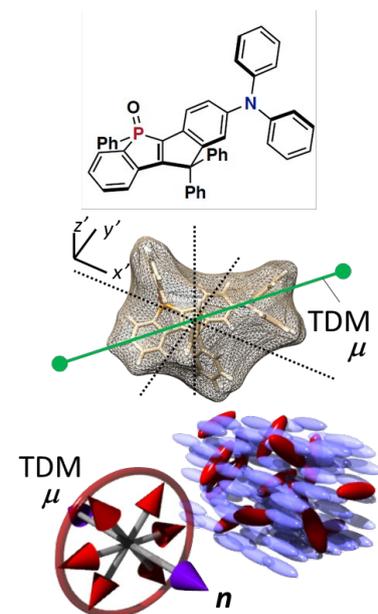
液晶や生体膜などの流動性異方媒体中で、異物がどのような状態をとっているのかは興味深い問題である。生体膜ではそれらの異方的な振る舞いが様々な機能に影響するし、液晶では添加分子が液晶場で配向する。キラルドーパント等では液晶の状態も変えてしまう場合もあるが、ここでは異方性場は変わらない程度の分子の添加を想定し、液晶中に添加された分子の状況を議論したい。添加分子は異方性場で平均的に異方的な配座を取るため、その分子が蛍光性の場合には蛍光も一般に異方性（偏光性）を持つ。この性質が注目され、古くから表示素子応用（ゲストホストモードと呼ばれる表示素子様式）に向け、吸収異方性と共に研究されていた。表示素子応用の他に、この蛍光異方性は非一様な配向状態（配向欠陥構造等）の可視化等に利用できるため（偏光顕微鏡では得られない情報が共焦点顕微鏡等で得られる）、生体観察を含めた基礎研究では重要な性質である。今回、名古屋大学のチームで新しく合成された一連のホスホールオキサイド系蛍光色素（図上が一例）がネマチック液晶中で置換基に応じた正から負までに及ぶ蛍光異方性（正の異方性は、蛍光がネマチックダイレクタと平行、負のそれはそれと垂直）を示すことが分かり、その実験結果と分子形状の解釈を試みた(1)ので報告する。

【結果と考察】

実験で得られた蛍光異方性の解釈のため、分子軌道計算により分子形状と蛍光の遷移双極子モーメント（TDM）ベクトルを求め（図）、それらを元に、ネマチック平均場中での分子中のTDMの2次のスカラオーダーパラメータを求めた。その結果、一連の分子において実験と理論の傾向の一致が得られ、まずは用いた理論での定性的な解釈が可能になった。より具体的には、分子形状が棒状では“なくなる”に従って正の異方性が少なくなる傾向と、分子のどちらかという長軸に対して直交してTDMを持つと負の異方性を示しやすくなる、ということを確認できた。言い方を変えると、今回の π 共役系の軸方向に非平行な方向に置換基が突き出てくると、負の異方性が出やすくなった。蛍光分子の形状が変化する（内部自由度がある）場合には、それも考慮した平均配座を考慮する必要はあるものの、得られた知見と用いた解析方法は、蛍光分子の異方性の予想やデザインに一般的に使えるだけでなく、異方性媒体中に添加された一般の分子（等）の形状からその異方的な状態の評価にも利用できるため、その活用が期待される。

【参考文献】

(1) T. Ohzono, T. Yatabe, C. Wang, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, *Commun. Chem.* **1**, 52, 2018.



過渡結合モデルにおける不均一なダイナミクス

(名古屋大学大学院工学研究科) 畝山多加志

【はじめに】

近年、高分子のからみあいを再現する粗視化モデルとして、高分子間に動的に生成消滅する過渡的なバネを導入するスリップスプリングモデル[1]が注目されている。スリップスプリングモデルをさらに粗視化し、1つの高分子を1粒子とするモデルとして過渡結合モデル（あるいは応答粒子ダイナミクス、RaPiD）[2]がある。過渡結合モデルは静的には理想気体でありながら動的には複雑な緩和や拡散挙動を示すモデルであり、単純なモデルであるにも関わらずからみあった高分子の粘弾性挙動をよく再現できる。最近の研究から、過渡結合モデルは過冷却液体で見られるような動的不均一性を示すことがわかってきた[3]。本講演では、過渡結合モデルの理論構造や運動の不均一性について議論する。

【モデルと結果】

多数の粒子からなる系を考える。粒子は基本的に Langevin 方程式に従って運動する。粒子間には一定確率で動的に線形バネが生成される。また、詳細釣り合いを満たすように一定確率でバネが消滅する。さらに、バネによって粒子間に実効的に引力が働くので、引力をちょうど打ち消すような斥力ポテンシャルを課す。(この斥力の導入により、バネの自由度を統計力学に消去すると静的には理想気体に帰着することが保証される[2].)

上記の過渡結合モデルを用いて数値シミュレーションを行ったところ、バネの効果で遅い緩和が生じるだけでなく、粒子の拡散挙動に明確な不均一性が生じる様子が見られた。過渡結合モデルの挙動は次元にほとんどよらず、不均一性は1次元系でも確認できる。図1に1次元系の粒子の軌跡の例を示す。バネのない単純な Brown 粒子の場合と異なり、粒子がまとまって協同的に動いている様子が観察できる。(これはある種のガラスのモデルにおける時空の「泡」[4]に類似している。) また、このような不均一性は非 Gauss 性パラメータや拡散性のゆらぎ[5]からも観測される。

【参考文献】

- [1] T. Uneyama and Y. Masubuchi, *J. Chem. Phys.* **137**, 154902 (2012).
- [2] T. Uneyama, *J. Chem. Phys.* **150**, 024901 (2019); P. Kindt and W. J. Briels, *J. Chem. Phys.* **127**, 134901 (2007).
- [3] Y. Hachiya, T. Uneyama, T. Kaneko, and T. Akimoto, *J. Chem. Phys.* **151**, 034502 (2019).
- [4] R. L. Jack, J. P. Garrahan, and D. Chandler, *J. Chem. Phys.* **125**, 184509 (2006).
- [5] T. Uneyama, T. Miyaguchi, and T. Akimoto, *Phys. Rev. E* **92**, 032140 (2015).

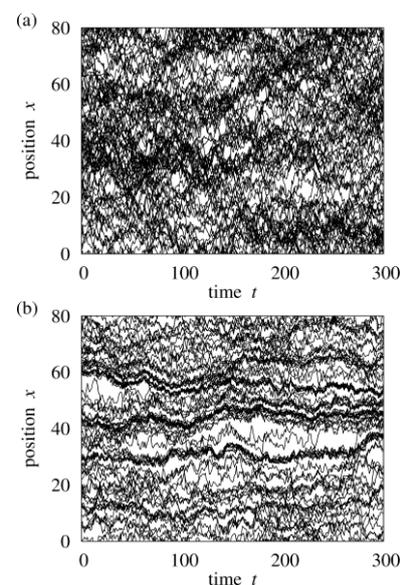


図1: 1次元(a) Brown 粒子と (b)過渡結合モデルの軌跡。

イオン固有効果の連続場理論

岡山大学異分野基礎科学研究所 岡本隆一

【はじめに】

希薄電解質溶液において、多くの場合、異なる種類の同価数イオンは同じ添加効果をもたらす。例えば、古くから知られる希薄電解質溶液の活量係数や浸透圧係数に対する Debye-Hückel 則、イオンの気液界面への負の吸着に対する Onsager-Samaras 則、また動力学においては(完全に同価数イオンに対して同じではないが)粘性率に対する Falkenhagen-Onsager-Fuoss 則などがある。一方で、イオン濃度が高くなってくると(1 価の塩の場合典型的には 0.05M 以上)、同価数イオンであっても、物理・化学的性質の違いが顔を出し始める。これはイオン固有効果(ion-specific effect)とよばれる。タンパク質の塩析(塩入)効果の強弱に関するイオン順列、いわゆる Hofmeister 系列もイオン固有効果の一例である。個々の現象に対するイオン固有効果は、過去に理論・コンピュータシミュレーション、実験研究により様々な知見が得られている一方、互いの関連については未だによくわからないことが多い。

【結果と考察】

本研究では、溶媒・イオンの自由度をあらわに取り入れた電解質溶液の連続場モデルをつくり、その性質を調べた。特に、溶媒・イオンの排除体積効果と、水和効果を取り入れる。前者は Mansoori-Carnahan-Starling-Leland モデルを、後者は Born モデルをつかう。希薄極限では通常の Poisson-Boltzmann 方程式や Debye-Hückel 理論を再現する。

まず、イオン活量係数と浸透圧係数、そしてイオン部分体積の塩濃度依存性のイオンサイズ依存性を調べた。その結果、これらにおけるイオン固有効果が排除体積効果と水和効果の拮抗・協働により説明できることがわかった。たとえば水溶液における実験によれば、カチオン(アニオン)サイズが小さい場合に、アニオン(カチオン)サイズを大きくしていくと、活量係数や浸透圧係数は大きくなる傾向がある一方、カチオン(アニオン)サイズが大きい場合この傾向は反転する。本研究によれば、この反転がカチオン(アニオン)サイズが溶媒分子と同程度のときに起こることが多種の溶媒に対して予想される(水の場合は確かにそうになっている)。

さらに、気液界面へのイオン吸着についても調べた結果、そのイオンサイズ依存性は水-空気界面の実験結果と整合的であった。ここでも排除体積効果と水和効果の拮抗が本質的に重要な役割をはたすことがわかった。

柔粘性 / 強誘電性結晶の分子動力学計算による検討

(産総研¹, 北大院理²) ○米谷 慎¹, 原田 潤²

【はじめに】：近年、柔粘性結晶相の低温側で強誘電性相を示す有機材料が見いだされ注目されている¹⁾。発見された材料は、キヌクリジウムイオン (HQ^+) と過レニウム酸イオン (ReO_4^-) とのイオン性結晶で、345K 以下の低温で通常結晶相、367K 以上の高温で柔粘性結晶相、その中間温度相の三つの相を示し、中間温度相、低温相が強誘電性を示す^{1,2)}。本報告では、この過レニウム酸キヌクリジウムの構造とダイナミクスを、分子動力学 (MD) 計算により検討した結果を報告する。

【計算方法】：キヌクリジウムイオンおよび過レニウム酸イオンを、general AMBER 力場を用いてモデル化し、電荷分布は B3LYP/6-31G(d)/LANL2DZ(Re) レベルの分子軌道計算による RESP 電荷を用いた。MD 計算は、GROMACS ver.5.1.5 を用いて定温・定圧 (1 atm) で行った。

【検討結果】：まず、上記モデル系の相転移挙動を調べるため、単結晶構造解析により得られている低温 (300K) 結晶相構造を初期構造として昇温 MD 計算 (各 2ns) を行った。得られた密度とキヌクリジウムイオン双極子の配向オーダーパラメータ P_1 の温度依存性 (図 1) から、345K および 365K 附近の相転移に対応した三つの相の存在を示す結果が得られた。各相代表温度のスナップショットからのキヌクリジウムイオン双極子方位分布 (図 2) から、低温側は結晶相、高温側は柔粘性結晶相が想定され、中間温度相では分布が三方向にスプリットした構造が得られた。各相で代表的に選択したキヌクリジウムイオンの双極子方位の軌跡 (図 3) から、中間温度相では、スプリットした三方位間のジャンプが、柔粘性結晶とは異なる特徴的なダイナミクスとして得られた。

【参考文献】：

- 1) Harada et al., *Nature Chem.*, **8**, 946, 2016
- 2) Tang et al., *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 207602, 2017

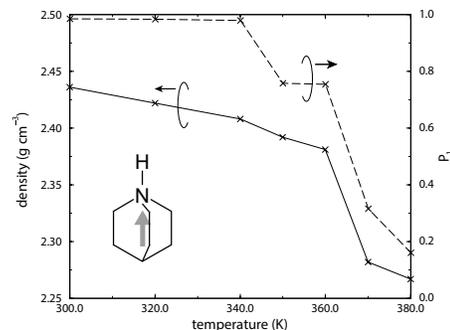


Fig. 1. Density and P_1 vs. temperature

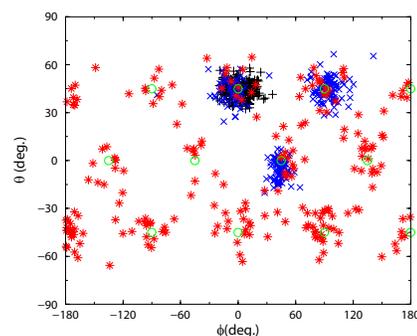


Fig. 2. Orientation distribution of HQ^+ dipoles: 300K (black), 350K (blue), 380K (red)

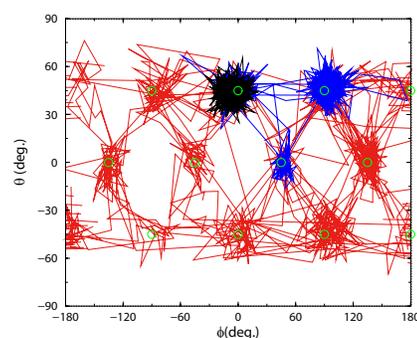


Fig. 3. Trajectory of an HQ^+ dipole orientation: 300K (black), 350K (blue), 380K (red)

非イオン界面活性剤／水系における共連続キュービック相の界面構造

(静岡大学¹、高輝度光科学研究センター²、オーストラリア国立大学³)

岡俊彦¹、太田昇²、Stephen Hyde³

【はじめに】

三重周期極小曲面様の構造を形成する物質はいくつか知られているが、リオトロピック液晶共連続逆キュービック相 (Q 相) もその一つである。I 型 Q 相ではジャイロイド (G) 型のみが観測されるが、II 型 Q 相ではプリミティブ (P) 型、ダイヤモンド (D) 型、G 型の 3 種類が確認されている。II 型では 2 分子膜の非極性領域にある中心面が極小曲面上に位置して 3 次元で周期的につながる。一方で I 型では極性領域の中心面が極小曲面上に位置する。

我々のグループでは II 型 Q 相である脂質モノオレイン／水系の Q 相 (1)、フィタントリオール／水系の Q 相 (2) それぞれについて小角 X 線単結晶構造解析に成功し、電子密度分布や界面構造を明らかにした。今回非イオン界面活性剤／水系で I 型 Q 相の小角単 X 線結晶構造解析に成功したので報告する。

【結果と考察】

I 型 Q 相の単結晶を作成し SPring-8 の BL40B2 で、回転結晶法を用いて回折データを収集した。このデータに対して既成のソフトウェアを用いて、回折斑点の指数づけ、強度積分などを行った。得られた構造振幅に対してモデルの最適化を行った。用いたモデルは、極性-非極性界面が無限周期極小曲面に平行な PS モデル、界面が平均曲率一定曲面になっている CMCS モデルである。最適化の結果、PS モデルは得られた構造振幅と R 因子が 0.05 程度とよく一致したが、CMCS モデルは 0.2 程度と一致を示さなかった。次に得られた構造振幅とモデルの位相を用いて電子密度を求めた。このことから極性領域はジャイロイド曲面上に位置しており、その極性-非極性界面は三重周期極小曲面の G 曲面に平行であった。非イオン界面活性剤分子の親水鎖の構造エントロピーを大きくするために、このような構造になっていると考えられた。

【参考文献】

- (1) Oka, "Polar-nonpolar interfaces of inverse bicontinuous cubic phases in phytantriol/water system are parallel to triply periodic minimal surfaces.", *J. Phys. Chem. B*, (2017), 121, 11399
- (2) Oka, Ohta, and Hyde, "Small-Angle X-ray Crystallography on Single-Crystal Regions of Inverse Bicontinuous Cubic Phases: Lipid Bilayer Structures and Gaussian Curvature-Dependent Fluctuations", *Langmuir*, (2018), 34, 15462

粘弾性体における体積応力緩和に起因するシアバンディング

(東大生研) 高江恭平 田中肇

【はじめに】

古典的な線形弾性論において、等方性媒質の応力テンソルは体積弾性率およびシア（せん断）弾性率により特徴付けられる。これらはその名が示す通り、それぞれ体積変化及びシア変形に対してのばね定数という意味合いがある。このように体積変形とシア変形に対して異なる応答を示すという性質は、高分子溶液やゲルなどの粘弾性体においてもよく知られている事実である[1]。しかし、構成方程式において両者の差異を取り入れた考察は驚くほど少ない[2]。僅かであっても媒質の圧縮性があるとき、レオロジー特性がどのように修正されるだろうか？本研究ではこの視点から粘弾性体の構成方程式を再検討し、レオロジー特性を定性的に変えてしまう可能性について議論する。特に後述するように、体積粘弾性とシア粘弾性の差異を取り入れることでシアバンディング[3]を記述できることを示す。

【結果と考察】

レオロジーの構成方程式としてOldroyd-B model から出発し、流体の圧縮性を考慮する[4]。ここで現象論的に、線形弾性論及び流体力学と同様に、体積粘弾性とシア粘弾性の違いを導入する。そうして得たモデルについて、単純シア流における応力のふるまいを解析的・数値的に詳細に調べた。その結果、i) 均一状態を仮定したとき、シア応力はシア率に対して非単調な依存性を示し、しかもその表式はJohnson-Segalman modelによるものに酷似していること、ii) その結果として、強いシアのもとではシア速度勾配の小さな領域と大きな領域とに、密度変化を伴って自発的に分離するという、シアバンド形成が起こること

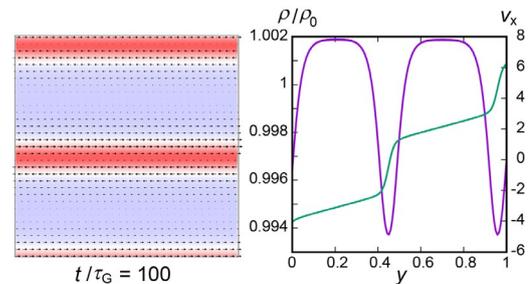


図:密度不均一化を伴うシアバンド形成の数値シミュレーション。

(図) などを見出した。これらの結果はJohnson-Segalman modelによるものと類似であるが、我々のモデルは体積粘弾性という巨視的な物理量を用いて、レオロジー不安定性の分類に成功したという点、そして将来的な拡張の容易さという点で重要であると考えられる。

【参考文献】

- [1] J. D. Ferry, *Viscoelastic Properties of Polymers* (John Wiley & Sons, 1980); 松下裕秀他『高分子の構造と物性』（講談社, 2013）.
- [2] H. Tanaka and T. Araki, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4966 (1997); L. Grassia, A. D'Amore, and S. L. Simon, *J. Rheol.* **54**, 1009 (2010).
- [3] P. Olmsted, *Rheol. Acta* **47**, 283 (2008); T. Divoux *et al.*, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **48**, 81 (2016); S.-Q. Wang, *Nonlinear Polymer Rheology* (John Wiley & Sons, Inc, 2018).
- [4] B. J. Edwards and A. N. Beris, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **36**, 411 (1990); P. C. Bollaudo and T. N. Phillips, *Arch. Rational Mech. Anal.* **205**, 1 (2012).

生体ナノマシンの状態サイクルモデル

(首都大学東京 理学研究科) 安田 健人、好村 滋行

【はじめに】

近年、酵素やモータープロテインといった生体ナノマシンの物理学が盛んに研究されている[1]。これらは ATP などの化学種の化学反応を触媒し、その過程で力学的な機能を発現する微小な機械として定義できる。このようなナノマシンの研究を行うには化学反応の物理化学と微小物体のダイナミクスを理解する必要がある。特に over damped な系では状態空間中のサイクルが機能を果たすために重要であることが指摘されてきた[2]。そこで、ナノマシンの状態サイクルに注目したシンプルなモデルを作成し、状態サイクルと化学反応のパラメータの関係性を調べることを目的とした。

【結果と考察】

ナノマシンと化学種の系を記述するために、変数として化学反応の進行を記述する反応座標 θ 、ナノマシンの状態を記述する状態変数 s_i を考える。次に以下のような自由エネルギーを考える。

$$G = -A \cos \theta - F \theta + \sum_i \frac{k_i}{2} (s_i - d_i \sin(\theta - \phi_i))^2$$

ここで、 A は化学種の活性化エネルギー、 F は化学ポテンシャルを意味する。また、化学反応とナノマシンの状態が結合していることを考え、第三項を考えた。ここで、反応座標と状態変数は周期的に相互作用していることが、ナノマシンを記述するために重要である。一方、ダイナミクスはオンサガーの現象論的方程式で記述されるとした。このとき、熱ゆらぎは揺動散逸定理に従う。また、以下で定義する状態サイクルに注目して計算を行う。

$$\Theta = 2 \int_0^t dt' s_1 s_2$$

まず、このモデルのランジュバンシミュレーションを行い、状態サイクルを計算した。その結果、 A と F に対して非自明な依存性があることがわかった(図 1)。特に、 A が大きくなると状態サイクルが著しく小さくなる事がわかった。これはナノマシンの機能が化学種の活性化エネルギーに強く依存していることを示している。これまで、化学ポテンシャルの影響に注目が集まっていたが、ナノマシンのダイナミクスを議論する際は活性化エネルギーが重要となることを示唆している。この現象をより理解するために、フォッカープランク方程式の解析解を求めることにした。その結果、 $A = 0$ かつ F が小さい極限では解析的な表現が得られた。今後は他領域に対してより詳細に解析して、解析解を得ることを目的として研究を行う。

【参考文献】

- [1] H. S. Muddana, S. Sengupta, T. E. Mallouk, A. Sen, and P. J. Butler, J. Am. Chem. Soc. 132(7), 2110-2111 (2010).
 [2] I. Sou, Y. Hosaka, K. Yasuda, and S. Komura, Phys. Rev. E 100, 022607 (2019).

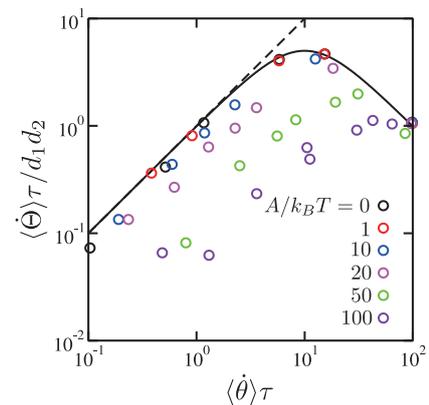


図 1 状態サイクルと反応速度

高次元ジャミング系の低周波数振動

(¹東京大学総合文化研究科, ²Montpellier Univ.)

¹島田真成, ¹水野英如, ²Ludovic Berthier, ¹池田昌司

【はじめに】

近年、ジャミング系と呼ばれるモデルに基づいてガラス物性を理解しようとする研究が盛んに行われている。ジャミング系とは、短距離の斥力相互作用しか持たず、熱運動が無視できる程度に巨視的な粒子系であり、粉体や泡などがその代表例である。ジャミング系は、密度変化に伴ってジャミング転移と呼ばれる相転移を示し、転移点よりも高密度側で固体的に振る舞う。このモデルと転移の理解はここ数十年で急速に進み、それらの研究で得られた知見は、アモルファス固体一般に普遍的な性質を議論する上でも役に立っている。

ジャミング系の著しい特徴の一つとして、固体相において弾性率や圧力などがスケーリング則に従うことが挙げられる。中でも、振動状態密度が従うスケーリング則は、固体の低温熱物性や塑性変形、過冷却液体の動力学を支配していると考えられており、注目を集めてきた。ジャミング系の振動状態密度には、 ω^* と表される特徴的な周波数が存在し、それより高周波数側で状態密度が周波数に依存せず一定になり、低周波数側で状態密度が周波数の2乗に比例することが知られている。数値的、理論的な研究によって、この2乗則は空間次元によらず存在する⁽¹⁾ことが分かっている。

この2乗則は、シミュレーションでは有限周波数で破綻することが知られており、より低周波数側には、結晶にも見られる平面波と、ガラス特有の局在化した振動の共存領域があることが分かっている⁽²⁾。一方で、理論では2乗則がゼロ周波数まで続くことが予想されており、シミュレーションの結果と大きく食い違っている。この差を解消できるかどうか、理論の正しさの試金石だといえる。

【結果と考察】

この数値実験と理論との差は、理論が平均場近似を用いており、空間次元を無限大にする極限でのみ厳密になることが原因であると考えられる。この予想を確認するべく、我々は9次元までのジャミング系の数値的な解析を行った⁽³⁾。低周波数領域にアクセスするために、粒子数にして約10万粒子系まで扱い、全周波数領域で状態密度の次元依存性を調べた。その結果、次元が高くなるにつれて、2乗則を示す領域が低周波数側に向かって伸びていくことが分かった(図1)。これは、理論の予想通り無限次元の極限で2乗則がゼロ周波数まで続くことを示唆している。

【参考文献】

- (1) Charbonneau et al., PRL **117**, 045503 (2016)
- (2) Mizuno et al., PNAS **114**, E9767 (2017)
- (3) Shimada, Mizuno, Berthier, Ikeda,
arXiv:1910.07238 (2019)

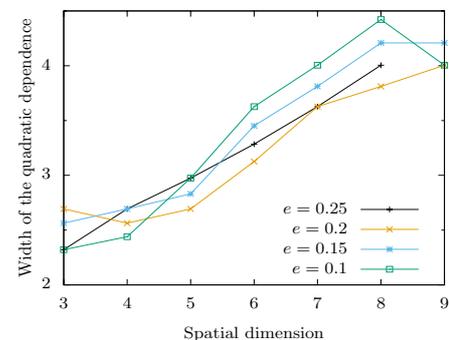


図 1: 2乗則の幅の次元依存性。異なる色は異なるプレストレス（低次元で圧力に比例する量）に対応している。

Johari-Goldstein β 過程の微視的観測とそのガラス転移への関わり

(京大複合研) 齋藤 真器名

【はじめに】

深く過冷却した液体やガラス中には様々な緩和過程が観測される。その中で、ガラス転移温度などガラス転移現象の本質的なパラメータと関連するような特性をもつ熟活性化過程が多くのガラス形成物質に共通して存在すること知られる。そのような緩和過程は Johari-Goldstein (JG) β 過程と呼ばれガラス転移現象に本質的な緩和であると考えられている。¹⁾ 近年ガラス材料の分野では、JG β 過程がガラスの安定性、力学特性、変形のメカニズムやガラス中のイオン伝導に強く関係していることが指摘され始めている。さらに、JG β 過程はタンパク質の folding 過程における基礎的な過程として、生命機能にも重要な寄与をしていることが見いだされている。このように JG β 過程は多様な系の特性や機能の起源となっているが、その実験的な観測は容易ではなく具体的な空間スケールなどの特性の多くは謎に包まれている。そればかりか、依然ガラス形成物質に普遍的に JG β 過程が存在するかも不明である。また、現状シミュレーションや理論も JG β 過程を満足に取り扱うことはできない。

我々は、JG β 過程の起こる時間スケール(ns \sim μ s)において、原子・分子スケールの空間相関の緩和時間を測定可能な新たな手法、時間領域干渉計をもちいたガンマ線準弾性散乱測定法を開発してきた。²⁾ これまで、この手法を用いることで他の手法にくらべ JG β 過程を明瞭に観測でき、JG β 過程の空間スケールを特定できることを示している。³⁾ 本研究では、この新手法を用いて JG β 過程の存在の普遍性、その空間スケール、およびガラス転移現象への関わりを明らかにするため、11 種類のガラス形成物質に対し詳細な研究を行ってきた。

【結果と考察】

Glycerol や Propylene carbonate などこれまで JG β 過程が明瞭に観測されたことがなく、その存在が議論の対象となっていたガラス形成物質を含む 11 種類のガラス形成物質全てに JG β 過程を見出すことができた。JG β 過程の典型的な空間スケールはいずれも数 Å スケールであった。加えて、JG β 過程の空間スケールの詳細な温度依存性測定から、JG β 過程の起こる空間スケールが低温に向けて局所化されていくことを見出した。さらに、拡散緩和時間の温度依存性がより super-Arrhenius な挙動を示すような”fragile”な物質ほど、系統的にガラス転移温度に向けて JG β 過程がより局所化することが分かった。本研究の結果、JG β 過程が多くのガラス形成物質に共通して存在しており、その空間スケールの局所性が拡散過程の振る舞いなどガラス転移現象と強く関係していることが明らかになった。

【参考文献】

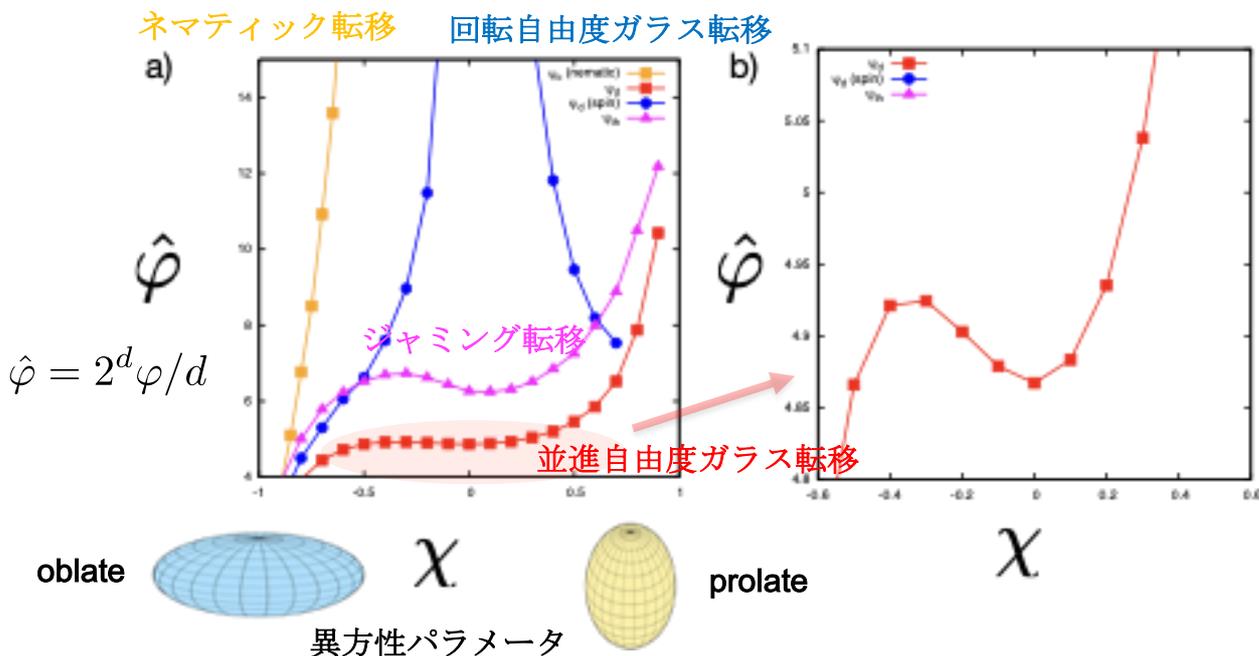
- (1) K. L. Ngai, *Relaxation and diffusion in complex systems*. (Springer, Berlin, 2011).
- (2) M. Saito, R. Masuda, Y. Yoda, M. Seto, *Sci. Rep.* 7, 12558 (2017).
- (3) M. Saito, S. Kitao, Y. Kobayashi, M. Kurokuzu, Y. Yoda, M. Seto, *Phys. Rev. Lett.* 109, 115705 (2012).

楕円コロイドにおけるガラス転移とネマティック転移の平均場理論

(大阪大学サイバーメディアセンター) 吉野 元

【はじめに】回転自由度がガラス転移やジャミングにおいてどのような役割を果たすのかは興味深い問題である。最も基本的な系として、剛体楕円体系を用い、これに対して無限大次元で厳密なレプリカ液体論（並進+回転)(1,2)に基づく解析を行った。具体的には、並進自由度および回転自由度の動的ガラス転移、ジャミング転移、ネマティック転移についての解析を行った。

【結果と考察】異方性パラメータと体積分率を軸として平均場相図を下図のように得た。異方性が小さい領域では並進・回転のガラス転移が分離している。また、ガラス転移密度、ジャミング密度ともに異方性に対して非単調な振る舞いを示す。これらの特徴は、モード結合理論(3)による動的転移の解析、実験・数値実験(4)によるジャミングの解析と定性的に整合した結果となっている。ただし無限大次元極限では **oblate/prolate** の違いが極端になっている。さらにこの系においてもガードナー転移が存在することがわかった。一方、ネマティック転移密度(1次転移)は動的ガラス転移の方よりも高密度側にあるが、異方性の強い領域ではジャミング、またガラス転移密度ともかなり近くなること注目される。



【参考文献】

- (1) H. Yoshino, SciPost Phys. 4(6), 040 (2018).
- (2) H. Yoshino, arXiv:1807.04095 and in preparation.
- (3) M. Lets, R. Schilling and A. Latz, PRE 62, 5173 (2000).
- (4) Donev et. al., Science 303, 990 (2004).

臨界点近くの2成分混合系中のコロイドの抵抗係数

(九州大学理学研究院^A, 慶応大学理工^B) 藪中 俊介^A, 藤谷洋平^B

【はじめに】

1成分流体中でのコロイドに対して働く抵抗力がストークス則で表されることが知られている。一方、溶媒が2成分の場合には、一般には、コロイド表面はいずれかの成分を吸着し、コロイド粒子の周りに吸着層が形成される。コロイドに力を加えて運動させた際には、この吸着層も変形し、コロイドに対して働く抵抗力が1成分流体中での場合に比べ変化することが予想される。実際、これまでの実験では、遠方で、組成が臨界組成で、温度が臨界温度に近く、相関長が長い場合には、抵抗係数の変化は相関長に比例することが発見されている[1]。

理論的には、岡本らによって2成分混合系に対してガウシアンモデル（系全体で相関長が一定であることが仮定されている）を用いた計算がなされ抵抗係数の変化は粒子表面での吸着が弱い極限では、相関長の6乗というより大きなべきであることが示されている[2]。しかし、粒子遠方で臨界点に非常に近い場合でも、壁付近の吸着が強ければ、表面付近の組成は臨界組成から大きくずれ、表面付近の相関長は非常に短くなるため、ガウシアンモデルの仮定は正当化できない。

【結果と考察】

我々は、臨界ゆらぎに起因した不均一な繰り込みの効果を Local renormalized functional theory [3]により記述し、コロイドの抵抗係数を計算した。その結果、下図に示されるように、吸着が強くと、相関長がある程度長い場合、抵抗係数の変化は相関長に線形に依存することを発見した。

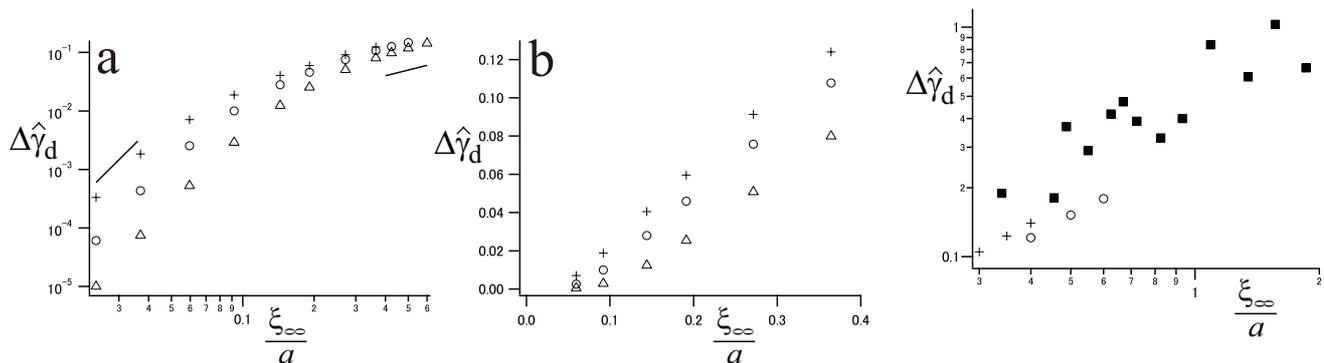


図 1: 理論計算によって得られたコロイドの抵抗係数の増加分と遠方の相関長の関係

((a) 両対数目盛、(b) 通常目盛)。

同じマークは同じ吸着の強さを固定し相関長を変化させた計算結果。吸着が強いほど抵抗係数の増加分は大きい。

(a) の直線の 2 つのガイドの傾きは、それぞれ 4 と 1 である。

図 2: Omari らの実験結果 (■で示されている) との理論計算の比較

【参考文献】

- (1) R. A. Omari et al, PRL 103, 225705 (2009)
- (2) R. Okamoto, Y. Fujitani and S. Komura, JPSJ 82, 084003 (2013)
- (3) R. Okamoto and A. Onuki, J. Chem. Phys. 136, 114704 (2012)

臨界 2 成分系における臨界カシミール効果と粘性の挙動の計測

(大阪電通大基礎理工学科) 影島 賢巳

【はじめに】

1978年に Fisher と de Gennes は、相分離に近い 2 成分系液体中に置かれた 2 面間に、相関長 ξ の増大に伴う特徴的な力が作用することを予言した[1]。これは、真空場の零点振動が金属面間に力を及ぼすカシミール効果との類似から、臨界カシミール効果と呼ばれる。実験的報告は、濡れ膜などの間接的な測定が主であったが、2008年に相互作用ポテンシャルの直接測定がなされ[2]大きな進展を迎えた。いっぽう、2 成分系の粘性の臨界点付近での異常な挙動については、1960年代にモード結合理論による Kawasaki の研究[3]などがあり、巨視的なシア粘性や拡散特性などの計測も報告されている。しかし、臨界カシミール効果と臨界粘性異常は密接に関連しているにも関わらず、両者を統合した計測や議論は乏しく、相関長と同程度かそれ以下の近距離レンジにおける局所的な実験結果も十分ではない。そこで、本研究では、近距離領域での複素力学応答計測が可能な原子間力顕微鏡(AFM)を用いて計測を行った。

【結果と考察】

2,6-ジメチルピリジン (ルチジン) を重量分率 0.29 で水と混合した 2 成分系は約 34.0 °C で 2 次の相転移をして相分離する。この液中で、直径約 15 μm のガラスコロイド球を接着した AFM の力センサーに変調を与えてロックイン検出することで、マイカ (白雲母) 基板とコロイド球の間の相互作用力の勾配 $\partial F/\partial z$ 、およびコロイド球の受ける粘性抵抗力の係数 γ を、距離 z の関数として同時に計測した。力勾配は、臨界温度 T_c に近づくにつれて近距離域で急激に負に増大するようになる。これは、臨界カシミール効果によって斥力が生じていることを意味する。水-ルチジン系では、親水性表面同士の臨界カシミール効果は通常は引力になる。斥力となったのは、マイカ表面から放出されたカリウムイオンが、水とルチジンとで異なる溶解度を持つため、臨界カシミール効果と強調した静電反発力が生じたためと考えられる。いっぽう、 γ は、 z が 20 nm より大きい領域では、 $\xi = \xi_0(1 - T/T_c)^{-0.63}$ におおむね比例する傾向を示し、先行研究と整合するが、 z が小さくなるにつれ不一致が大きくなることがわかった。

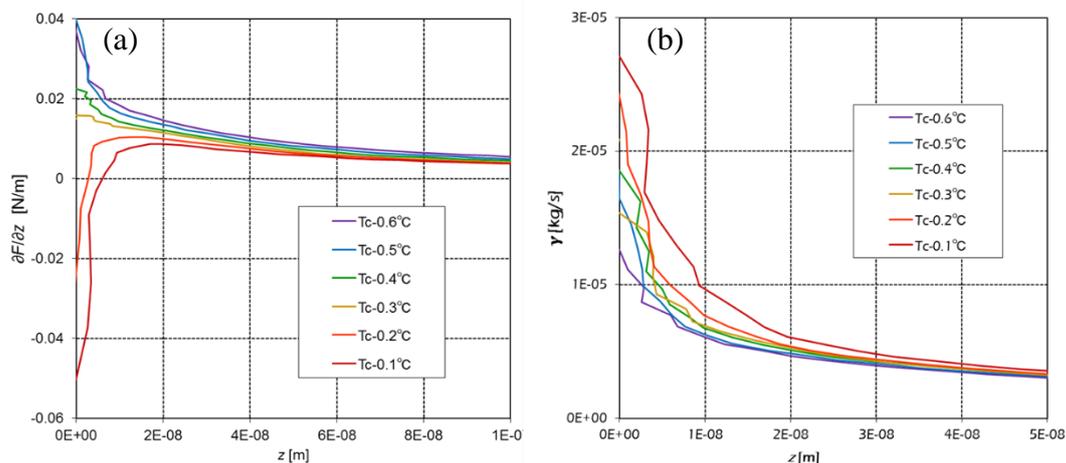


図 1 T_c 以下 0.6°C から 0.1°C の範囲で計測された力勾配(a)と粘性抵抗係数(b)の z 依存性

【参考文献】

- (1) M. E. Fisher and P. G. de Gennes; C. R. Acad. Sc. Paris B **287** (1978) 207.
- (2) C. Hertlein, L. Helden, A. Gambassi, S. Dietrich and C. Bechinger; Nature **451** (2008) 172.
- (3) K. Kawasaki, Ann. Phys. (N. Y.) **61** (1970) 1.

ダイナミクスを適切に記述する自由エネルギーと反応座標の探索

(阪大基礎工) 金 鋼

【はじめに】

多くの化学反応系において、自由エネルギーを正確に描画することでダイナミクスを正しく理解できることが期待される。一方で、溶媒分子を含む凝縮系では、膨大な数の変数の中から1, 2個を反応座標として描いた分布関数を自由エネルギー曲面とみなすことが多い。このときの反応座標は物理的直観に基づいて事前に選択されているが、そもそも選択された反応座標による自由エネルギー曲面が安定状態間の遷移経路を適切に記述できているかは非自明である。このような自由エネルギー曲面の反応座標選択に関する諸問題は、遷移状態理論に立脚した分子動力学シミュレーションのサンプリング手法の様々な開発によって解決されつつある。我々は、これらをソフトマターへ展開することを目的として研究をおこなっている。講演では、(a) ダメな自由エネルギー曲面の具体例として過冷却水における水素結合破断プロセス、(b) コミッターとよばれる指標とその最適化による反応座標探索について、我々の最近の研究を紹介したい。

【結果と考察】

(a) 分子動力学シミュレーションにより、過冷却された水における水素結合組み換えダイナミクスを解析した。そこで水分子間の水素結合に対して水分子 2 量体の分子間距離 R と分子間角度 β の 2 変数を用いた。得られた自由エネルギーの鞍点は回転運動に伴う角度 β の増加によって水素結合が破断することを予測していた。ところが、実際の破断経路が自由エネルギー曲面上をどのように移動していくのかを解析したところ、過冷却された状態になると、自由エネルギー曲面の鞍点を通過しない遷移経路成分が増大することがわかった。この遷移経路は角度 β の増大ではなく主に距離 R を増大させる分子の並進運動によって起こるものであった。すなわち、遷移状態を通過せずより高い自由エネルギー障壁を通過する遷移経路成分が増大することを意味する (1)。

(b) タンパク質の二次構造の理解に、主鎖二面角 ϕ , ψ を反応座標としたラマチャンドランプロットが理論的・実験的によく用いられている。本研究ではアラニンジペプチドの異性化反応をターゲットとして反応座標探索をおこなった。任意の構造に対して生成物 B へ遷移する確率をコミッターという。遷移経路サンプリングと分子動力学シミュレーションを組み合わせることによりコミッターを事前に定量化し、また構造に関する説明変数として分子内の全ての二面角のデータセットとして用いる。コミッターを最適化する最尤推定により、遷移状態を正しく表現する反応座標の探索をおこなった。その結果、主鎖二面角 ϕ , ψ 以外の自由度が正しい反応座標に寄与していることがわかった。

【参考文献】

(1) Kikutsuji, T., Kim, K., & Matubayasi, N. J. Chem. Phys., 148, 244501 (2018).

Hydrodynamics of sedimenting squirmers with rotlet dipole

Federico Fadda, John Jairo Molina, Ryoichi Yamamoto

Department of Chemical Engineering, Kyoto University, Kyoto 615-8510, Japan

The squirmer model is theoretical model introduced to study microorganisms like algae and bacteria. It consists in a spherical particle whose self-propulsion is ensured by a surface velocity field (1).

It is well established in literature that the presence of walls can strongly modify the motion of microorganisms. The bacterium *E. Coli*, indeed, is known to perform clockwise trajectories near a solid boundary (2). On the other hand the gravity force, ubiquitous in nature, represents another factor that can affect the motion of microorganisms (3).

In this work, using the Smoothed Profile Method (4), we combine all of these features studying the dynamics of a sedimenting squirmer under the effect of the gravity force, near a solid boundary taking into account the rotlet dipole term (5).

Computing quantities like the stationary swimming velocity, the stable swimming height, the stationary orientation and curvature radius we are able to characterize the dynamics of the single squirmer.

In case of neutral squirmers and pullers, the gravity causes both of them to sediment to the bottom wall, arresting their motion and reorienting them in a direction perpendicular to the wall. Pushers, instead, exhibit continuous motion with tilted direction.

When the rotlet dipole term is neglected and the “classic” squirmer model is considered, all of types of squirmers swim in straight trajectory. When the rotlet dipole term is introduced, it causes a deviation from the straight path in circular trajectories whose radius of curvature strongly depends by the magnitude of the rotlet dipole term.

After studying the single squirmer, the dynamics of a multitude of squirmers is considered.

References:

- (1) M.J. Lighthill, *Commun. Pure Appl. Math.* **5**, 109 (1952); J.R. Blake, *J. Fluid Mech.* **46**, 199 (1971).
- (2) E. Lauga, W. R. DiLuzio, G.M. Whitesides and H.A. Stone, *Biophys. J.* **90**, 400 (2006).
- (3) F. Rühle, J. Blaschke, J.-T. Kuhr and H. Stark, *New J. Phys.* **20**, 025003 (2018).
- (4) J.J. Molina, Y. Nakayama and R. Yamamoto, *Soft Matter* **9**, 4923 (2013); Y. Nakayama and R. Yamamoto, *Phys. Rev. E* **71**, 036707 (2005); Y. Nakayama and R. Yamamoto, *Eur. Phys. J. E* **26**, 361-368 (2008).
- (5) E. Lauga, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **48**, 105 (2016).

Learning the constitutive relation of non-newtonian fluids with memory

(京都大学大科化学工学専攻) Naoki Seryo, John J. Molina, T. Taniguchi

【はじめに】 Describing the dynamics of polymeric flows is a challenging problem due to the separation of length- and time-scales between the microscopic dynamics of the polymer chains and the macroscopic dynamics of the flow. The current state-of-the-art techniques resort to Multi-Scale Simulation Methods in which both degrees of freedom are coupled to each other. However, this requires incredible computational costs. In this study, we extend a recently developed learning strategy to polymeric systems with memory. We use training data obtained at the microscopic scale to learn the corresponding constitutive relation. This allows us to solve for the (fast) macroscopic model, while still maintaining the necessary microscopic information.

【結果と考察】

The current standard approach for studying polymeric flows is to use a Multi-Scale Simulation Method (MSS) to directly couple the microscopic and macroscopic degrees of freedom through the stress and strain rate fields. This can be achieved, for example, by employing Lagrangian fluid particles containing polymer chains(1). Instead, we propose to use the microscopic model to “learn” the corresponding constitutive relation. This constitutive relation can then be used to perform macroscopic flow simulations, without having to consider the microscopic degrees of freedom explicitly, but still maintaining the appropriate information about the stress/strain relationship.

This learning strategy was first proposed by Zhao et al.(2) to consider Non-Newtonian flows, but memory effects were not taken into account. In this work, we show how to extend this procedure to include memory effects and thus consider more realistic polymeric flows. Using a suitable microscopic model of the polymer chains, simulations at fixed strain-rate ($\dot{\gamma}$) are performed to generate training data consisting of stresses (σ) and their time-derivatives ($\dot{\sigma}$). This training data ($\dot{\gamma}, \sigma, \dot{\sigma}$) is then used within a Gaussian-Process Regression (GPR) to infer the constitutive relation, i.e., $\dot{\sigma}(\dot{\gamma}, \sigma)$. This constitutive relation can then be used to predict how the stresses in the fluid are changing in time. We note that (a) no assumptions are made regarding the functional form of the constitutive relations, and (b) at the end of the training we cannot say what the functional form is, but we can predict the value of $\dot{\sigma}$ given the values of $\dot{\gamma}$ and σ . To validate the method, we used Hookean dumbbells as our microscopic polymer chain model, and considered the case of simple-shear flow between flat parallel plates, which is effectively a 1D problem, for which analytic solutions are known. We obtained very good quantitative agreement with the MSS results at a fraction of the cost (3). Current work is underway to consider more complicated flows (e.g. contraction-expansion), for which all components of the stress-tensor are required.

We acknowledge support by the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) KAKENHI Grant No. 17K17825 and 19H01862 and the Ogasawara-Foundation.

【参考文献】

- (1) T. Sato, K. Takase, and T. Taniguchi. J. Soc. Rheol. Jpn. 44, 265 (2016)
- (2) L. Zhao, Z. Li, B. Caswell et al., J. Comp. Phys. 363, 116 (2018).
- (3) N. Seryo, T. Sato, J. J. Molina, T. Taniguchi, in preparation.

メカニカルメタマテリアルのゴールドストーンモードと非線形力学挙動

(九大工) 山口 哲生・姫野 衛・張 鶴鳴

【はじめに】

メカニカルメタマテリアルとは、負のポアソン比などの特異な力学特性を意図してメソスケール構造設計がなされた、一群の人工物質（構造）を指す^[1]。構造と力学的機能との相関に強い関心を持たれているほか、最近ではオリガミ・キリガミなどの拘束系の力学、トポロジカル物性との関連にも注目が集まっている。しかしながら、その研究の多くは微小変形挙動（特に負のポアソン比）に関するものであり、塑性変形・座屈・破壊を伴うような巨大変形特性については研究例が乏しく、ほとんど理解されていない。

そこで本研究では、メカニカルメタマテリアルの線形・非線形力学挙動やそれらの相関を調べることにした。まず、微小変形挙動を特徴づけるため、ノーマルモード解析を試みた。次に、巨大変形挙動を見るため、1軸伸長に関する実験および数値計算を行った。その結果、ゴールドストーンモードを介して線形力学と非線形力学とが結びつく新奇現象を見出すことに成功した^[2]。

【結果と考察】

本研究で用いたメカニカルメタマテリアルの模式図を図1に示す。一体型の既存構造とは異なり、剛体ディスクと剛体リンク、バネを接続することで“機構的”に構成した。

次に、上記モデルに対して外力0の状態でのノーマルモード解析を行ったところ、剛体モード以外に周波数が0となるモード（ゴールドストーンモード）が現れることが分かった。これは、ディスクの回転角が全て揃った状態で回転角が復元力0で変形するモードに対応しており、回転角の一樣な変換 ($\theta \rightarrow \theta + \alpha$) に対して微小変形挙動が不変であることを意味する。

さらに、初期条件として3種類の異なる初期ディスク角 $\theta_0 = 0, 0.45, 0.46$ を設定して1軸引張実験を行った。その結果、図2の応力-ひずみ曲線に示されるように、微小変形挙動はほぼ同一であるものの、巨大変形挙動に大きな違いが現れることを見出した。これは、ゴールドストーンモードを用いた非線形力学特性の制御が可能であることを示唆している。

【参考文献】

- [1] T. C. Lim, Auxetic materials and structures, Springer, 2015.
 [2] T. Yamaguchi, H. Zhang, M. Himeno, Y. Sawae, in preparation.

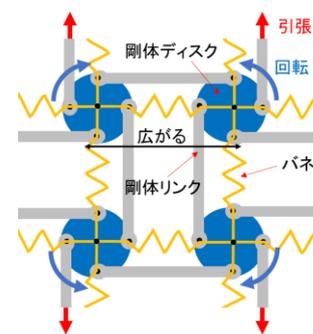


図1：“機構的”メカニカルメタマテリアルの基本格子。ディスク端に繋がれたリンクを上下に引っ張ると、ディスクが回転し、水平方向の重心間隔が広がることで負のポアソン比を示す。

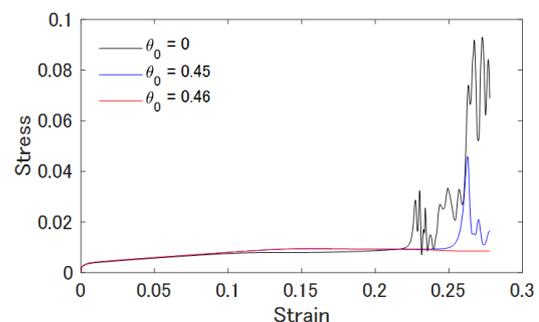


図2：3つのディスク回転角を初期状態としたときの応力-ひずみ曲線。

細胞サイズの生体高分子液滴における相転移と分子拡散

(東大院総合文化・先進機構) 柳澤 実穂

タンパク質などの生体高分子が多量に存在する細胞中では、様々な相転移が生じている。例えば、アクチン等の骨格系タンパク質がしめす液体-固体（ゾルーゲル）相転移は、細胞運動の鍵となることが知られている。また近年、RNA や RNA 結合タンパク質が凝集し、膜を持たないオルガネラとして機能することも分かってきた。この凝集体形成は、異なる生体高分子間の相分離に由来すると考えられ、研究が活発化している。

こうした生体高分子が示す相転移現象は、ミリリットル量以上のバルク系では古くから研究がなされてきた。一方で近年、リン脂質膜で覆われたピコリットル量の生体高分子液滴を用いて、液滴サイズの減少に伴って、バルク系とは異なる相転移が生じることが明らかとなってきた。例えば、コラーゲンを変性させて得られるゼラチンゲルでは、ゲル化前の液滴サイズ減少にともないナノ構造が変化する (1)。また、DNA とポリエチレングリコール (PEG) 混合水溶液などでは、バルク系では均一相を示すにも関わらず、小さな液滴中では 2 相分離が生じたり、相分離のパターンが液滴サイズに依存して変化したりする (2-4)。

このようなバルクとは異なる相転移が生じる液滴サイズは、細胞サイズに該当する半径 30 μm 以下であることから、相転移が変化する要因の解明は、細胞内相転移の機構解明や細胞サイズの物理的意味を明らかにすることに繋がると考えられる。そこで、より基本的な系として、1 成分高分子溶液からなる液滴中での分子拡散の解析から、サイズ依存的な相転移が生じる原因へアプローチすることにした。これまでに、高濃度高分子液滴中の分子拡散は、サイズ減少に伴い変化することを見出している (5, 6)。この現象が生じる理由として、微小体積と界面の効果に着目し、前者を液滴体積、後者を液滴界面からの距離および液滴界面面積/体積比を変数とする分子拡散の解析を行った。その結果、サイズ依存的な分子拡散をもたらす上で最も支配的な変数は、液滴界面面積/体積比であることを見出した (6)。本講演では、こうした細胞サイズ依存的な生体高分子溶液の相転移現象と、その根本的要因に関わると考えられるサイズ依存的な分子拡散およびその要因について紹介する。

【参考文献】

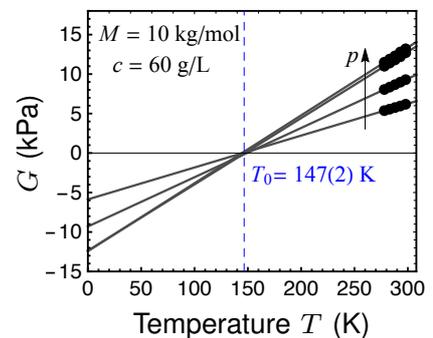
- (1) A. Sakai, et al., *ACS Cent. Sci.*, 4:477 (2018)
- (2) N. Biswas, et al., *Chem. Phys. Lett.*, 539: 157 (2012)
- (3) M. Yanagisawa, et al., *Int. Rev. Cell. Mol. Biol.* (2014)
- (4) M. Yanagisawa, *PNAS*, 111:15894-15899, (2014)
- (5) C. Watanabe & M. Yanagisawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20, 8842 (2018)
- (6) C. Watanabe, Y. Kobori, J. Yamamoto, M. Kinjo, M. Yanagisawa, *submitted*.

高分子ゲル弾性の普遍的熱力学関数

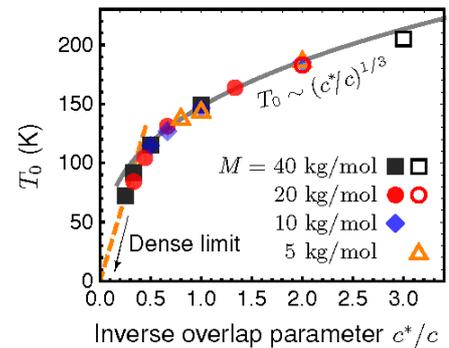
(東京大学工学系研究科) 作道直幸、吉川祐紀、酒井崇匡

【はじめに】 ゴムや高分子ゲルは、鎖状高分子の網目構造からなり、その弾性は熱力学第二法則に基づくエントロピー力によって説明される。実際にエントロピー力が支配的であることを確かめるには、体積一定の条件下において、ずり弾性率 G の絶対温度 (T) 依存性を測定すれば良い。関係式 $G_S = TdG/dT$ を用いて、弾性率 G を $G = G_S + G_U$ と、エントロピーの寄与 G_S と内部エネルギーの寄与 G_U に分離することができるからである。ゴムにおいては、実験から $G \approx G_S$ が確かめられ、ゴム弾性を記述するほとんどの理論は、 G_S のみに注目して構築されてきた [1]。一方、高分子ゲルにおいては、実験的検証なしに $G \approx G_S$ として、慣習的にゴム弾性論がそのまま用いられてきた。(例えば、[2])

【負のエネルギー弾性】 我々は、ミクロな構造パラメータ (プレポリマーのモル質量 M , 濃度 c , 結合率 p) を制御可能であり、かつほぼ均一な網目構造を持つ高分子ゲル (Tetra-PEG ゲル [4]) を用いて、「 $G \approx G_S$ が成り立つのか」という問題に取り組んだ。実験の結果、高分子ゲルには、無視できないほど大きな負の G_U が存在することを発見した。



【弾性の普遍的熱力学関数】 さらに、 p のみを変化させた時、 G の T 依存性の外挿直線が、 T 軸上の一点 (T_0) を通ることが判明した (上図)。従って、弾性率は $G = a(T - T_0)$ と書け、 $G_S = aT$ および $G_U = -aT_0$ となる。 T_0 を c/c^* に対してプロットすると 1 つのマスターカーブに乗る (下図)。ここで、 $c^* = c^*(M)$ はプレポリマーの重なり合い濃度である。 T_0 は、溶媒を減らした濃厚極限 ($(c/c^*)^{-1} \rightarrow 0$) で、ゼロに近づく。この結果は、溶媒のほとんど無いゴムにおいてエネルギー弾性が無視できる ($G_S \gg |G_U|$) という従来知見と整合する。逆に言うと、負のエネルギー弾性は溶媒由来であることを示唆する。また、因子 a は、次元解析および実験データから $a = cRg/M$ と書ける。ここで、 R は気体定数であり、 $g = g(p, c/c^*)$ は、無次元の二変数関数。



まとめると、弾性率は、 $G = cgR(T - T_0)/M$ と書ける。この表式は、Tetra-PEG ゲルを用いて得られたが、ポリマー鎖と溶媒の種類を変えても共通と考えられる。ただし、 $T_0(c/c^*)$ および $g(p, c/c^*)$ の具体的な関数形は、ポリマー鎖と溶媒の種類に依存する。なお、弾性率の関数形が上記であることを認めれば、熱力学関数 (例えばヘルムホルツの自由エネルギー) の内、弾性由来の部分の関数形も完全に決まる。

【参考文献】

- (1) Flory, P. Principles of Polymer Chemistry. (Cornell University Press, 1971).
- (2) M. Zhong, et al., Science 353, 1264-1268 (2016).
- (3) T. Sakai, et al., Macromolecules 41, 5379-5384 (2008).

アクトミオシン皮質形成の理論研究

(理研 BDR) 多羅間充輔、柴田達夫

【はじめに】

細胞は自ら力を生成することで様々な自律運動を示す。その力生成を担うのは分子モーターである。しかし、ナノメートルオーダーのミクロな分子モーターが、どのようにマイクロメートルスケールの細胞の運動を引き起こすのかは自明ではない。

接着性の細胞の場合には、アクチンや微小管といった繊維状の細胞骨格と、それらに特異的に結合し、ATPなどの化学エネルギーを消費することで繊維上を能動的に移動するミオシン、キネシン、ダイニンなどのモータータンパクの存在が知られている。特に、アクチン繊維とミオシンモーターは細胞膜付近に集合し、ネットワーク構造を作ることで、大きな収縮力を発生することは周知の事実である。しかし、高分子の境界付近での枯渇力を考えると、アクチン繊維が細胞膜付近に強く発現することは、実は、自明なことではない。驚くべきことに、これまでにアクトミオシン皮質 (cell cortex) に関する理論研究は非常に多く行われてきたにもかかわらず、その形成過程に関する研究は行われていなかった。

【結果と考察】

我々は、細胞膜内においてミクロな細胞骨格と分子モーターとがどのようにマクロな細胞の運動を実現するかを調べるために理論研究を行なっている。弾性フィラメントと、異なる二つのフィラメントに結合して、フィラメント上を「歩く」ことで能動的に力を出す双頭型のモーターとの力学モデルを用いて、細胞膜を模した境界内部での振る舞いを調べた。本発表では、境界内でのアクチンとミオシン分子とが、どのように枯渇力に打ち勝ってアクトミオシン皮質が出現するかに関して、最近得られた結果について紹介する。

Physical models of active membranes in Biology

(Kyoto University & University of Warwick, UK) Matthew Turner

Abstract

We analyse the coupling between hydrodynamic flows and geometry on fluid membranes. We study biological membranes that are associated both with the formation of organelles and in the topology changes associated with vesicular transport. We identify a new class of hydro-osmotic instabilities (1) that may be responsible for the *de novo* emergence of an organelle known as the *Contractile Vacuole* (2), responsible for osmoregulation. We also identify a shape instability that occurs for sufficiently large membrane shear gradients on curved geometries, hydrodynamic in origin (3), see Fig 1.

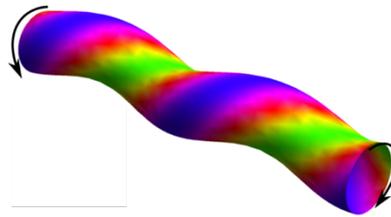


Fig 1 We predict a helical instability on membrane tubes when sheared (twisted) above a critical rate. Color shows normal stress (blue out, green in).

This may play a role in cutting the neck of a budding endocytotic vesicle under the action of a motor protein called *Dynamin* (4). Our predictions can be tested in vitro, e.g. using magnetic tweezers on membrane tubes pulled from aspirated giant vesicles.

References

- (1) Hydro-osmotic instabilities in active membrane tubes, S.C. Al-Izzi, G. Rowlands, P. Sens, M.S. Turner, *Phys. Rev. Lett.* **120** (13), 138102 (2018).
- (2) Periodic tension development in the membrane of the in vitro contractile vacuole of *Paramecium multimicronucleatum*: modification by bisection, fusion and suction, T. Tani, R. Allen, and Y. Naitoh, *J. Exp. Biol.* **203**, 239 (2000).
- (3) Shear-driven instabilities of membrane tubes and Dynamin induced scission, S.C. Al-Izzi, P. Sens, M.S. Turner, arXiv:1810.05862
- (4) GTP-dependent twisting of dynamin implicates constriction and tension in membrane fission, A. Roux *et al.*, *Nature* **441**, 528 (2006).

Glass stability changes the nature of the yielding transition under oscillatory shear

Wei-Ting Yeh ¹, Misaki Ozawa ^{2,3}, Kunimasa Miyazaki ¹,
Takeshi Kawasaki ¹, and Ludovic Berthier ²

¹ *Department of Physics, Nagoya University, 464-8602 Nagoya, Japan*

² *Laboratoire Charles Coulomb (L2C), Universite de Montpellier, CNRS, Montpellier, France*

³ *Departement de Physique, Ecole Normale Supérieure, Paris, France*

Amorphous solids, such as concrete, colloidal glasses, and metallic glasses, have been proposed as novel material for industrial and commercial applications nowadays thanks to their excellent mechanical strength and lack of “defect” of the systems. However, their applications are largely limited due to their brittleness and low plasticity after large deformation. Understanding the way of controlling brittleness, or equivalently the yielding behavior, is thus important for guiding material design. Recent simulations studies have revealed that the yielding behaviors of glassy systems depend sensitively on the extent of both mechanical and thermal processing. In particular, thermal annealing generally involves quenching the system from different equilibrium temperature, and mechanical processing involves the cyclically shearing or compressing the system. It is interesting to understand the difference and limitations of those two annealing processes. We carry out molecular dynamics simulation to study glass-formers under athermal quasi-static oscillatory shear. By changing the initial thermal annealing degree of the system, we are able to comprehensively understand the interplay of mechanical and thermal processings on the systems. Our results suggest that the extent of mechanical processing on the system depends crucially on the initial degree of thermal annealing. In particular, there exists a critical degree of thermal annealing so that the effect of mechanical processing on the system can be separated into two regimes. For initially poorly annealed system, oscillatory shear is able to stabilize the systems into more stable configuration. In other words, the initial memory of the system is gradually wiped out due to mechanical processing. On the other hand, for initially well annealed system, it is found that mechanical processing ceases to function anymore, meaning that system’s initial memory is maintained. Our analysis also reveals that the separation of two regimes could be originated from the fundamental properties of potential energy landscape of the model of glass-former. Some predictions from this aspect are proposed and tested in this work.

Shear viscosity of two-state enzyme solutions

¹ Department of Chemistry, Tokyo Metropolitan University,

² Raymond and Beverly Sackler School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University

Yuto Hosaka¹, Shigeyuki Komura¹, David Andelman²

[Introduction]

We discuss the shear viscosity of a Newtonian solution of catalytic enzymes and substrate molecules [1]. The enzyme is modeled as a two-state dimer consisting of two spherical domains connected with an elastic spring (see Fig. 1). We take into account the enzymatic conformational dynamics, which is induced by the binding of an additional elastic spring that represents a bond between the substrate and enzyme [2, 3]. Employing the Boltzmann distribution weighted by the waiting times of enzymatic species in each catalytic cycle, we obtain the shear viscosity of dilute enzyme solutions as a function of substrate concentration and its physical properties. The substrate affinity distinguishes between fast and slow enzymes, and the corresponding viscosity expressions are obtained. Furthermore, we connect the obtained viscosity with the diffusion coefficient of a tracer particle in enzyme solutions.

[Results and Discussion]

By analytically solving the constitutive equation, we find that the enzyme solution viscosity, η_e , presents both decreasing and increasing behaviors as the substrate concentration is increased, depending on the physical properties of the binding substrate. For a substrate larger than the enzyme, we see that η_e behaves as if no substrate were present because it does not affect the size of the enzyme.

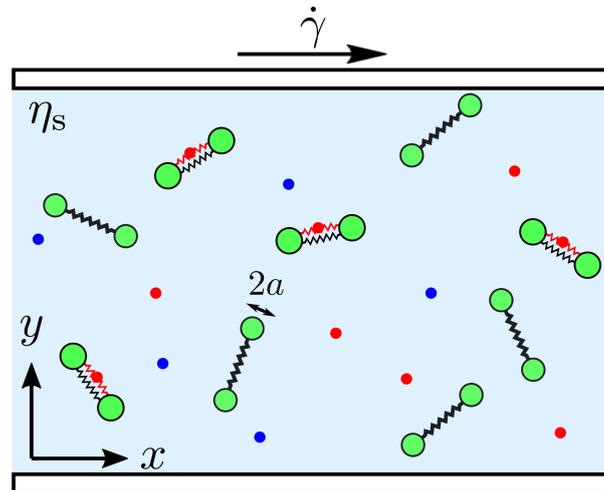


FIG.1 Schematic representation of a dilute solution of two-state dimers under steady shear flow with shear rate $\dot{\gamma}$

[References]

- [1] Y. Hosaka, S. Komura, and D. Andelman, arXiv:1909.07207 (2019).
- [2] A. S. Mikhailov and R. Kapral, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **112**, E3639 (2015).
- [3] Y. Hosaka, K. Yasuda, R. Okamoto, and S. Komura, Phys. Rev. E **95**, 052407 (2017).

遊泳微生物テトラヒメナの壁スライディング

(MPI 陸生微生物 A, 北大電子研 B, 京大院理 C) 大村拓也 A, 西上幸範 B, ○市川正敏 C

【はじめに】

近年、遊泳微生物の挙動に着目した研究が生物学だけでなく、流体力学的な観点からも盛んになってきている。彼らの単体・集団運動の秩序は、相転移を示したり液晶と同様の対称性を見せたりもする事から、バーチャルなソフトマテリアルとも言えるだろう。

我々は、ゾウリムシに代表される繊毛虫の一種が壁面付近で新奇な遊泳運動を示すことを発見した。そこで、実際の細胞を定量観測し、流体数値計算と比較することで、繊毛虫遊泳に見られた特徴のどこまでが生物的で、どこからが流体力学的に説明できるものなのかを明らかにすることを試みた(1,2)。

【結果と考察】

実験では、繊毛虫の *Tetrahymena pyriformis* が壁面付近で遊泳する様子の軌道や繊毛運動、流動場を測定した(図1)。次に、自己遊泳モデルに観測結果から得られた性質を組み込み、観察された特異な要素の何が壁面上のスライディング運動に作用しているのかを同定した(図2)。得られた結果から想定される自己遊泳物体の性質を、実際の繊毛虫の生態と比較しつつ議論する。

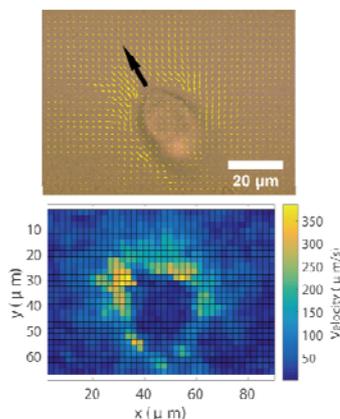


図1：(上) 可視化粒子で測定した基板上を運動する繊毛虫周りの流れ場。(下) 流れ場の速度の絶対値。文献(1)より。

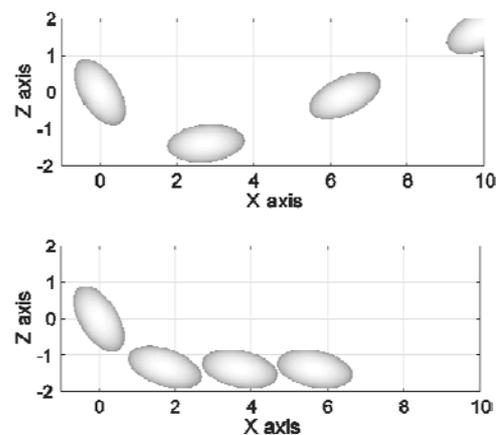


図2：Swimmerが固液界面に衝突する様子の3次元流体数値計算結果。(上) 既存のモデル。(下) 実験で得られた条件を組み込んだモデル。文献(1)より。

【参考文献】

- (1) T. Ohmura, Y. Nishigami, A. Taniguchi, S. Nonaka, J. Manabe, T. Ishikawa, M. Ichikawa, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 115, 3231 (2018).
- (2) Y. Nishigami, T. Ohmura, A. Taniguchi, S. Nonaka, J. Manabe, T. Ishikawa, M. Ichikawa, Comm. Int. Biol. 11, e1506666 (2018.)

Control of cell migration and colony growth by contact inhibition

(京都大学 福井謙一記念研究センター) Simon Kaspar Schnyder

【はじめに】 The collective motion and proliferation of cells are behaviors which are central to biological processes such as the formation of embryos, the closure of wounds, and metastasis of tumor cells. Essential for the regulation of these processes is contact inhibition, which describes the tendency of cells to stop migration, or change direction, or stop cell divisions, when coming into contact with other cells. In order to reduce the complexity of the systems under study, it is valuable to investigate well controlled model systems.

【結果と考察】 We developed a minimal model for cells which proliferate and crawl on a substrate. Each cell consists of two disks, modeling the cell body and a protrusion such as a pseudopod. The disks are connected by a finitely extensible string and the motility of the cell is proportional to the spring's extension. The model naturally exhibits contact inhibition of locomotion and proliferation.

Despite the model's simplicity, the collective migration behavior of the cells is non-trivial and depends on the shape of the cells and whether contact inhibition is enabled. Cells with a small, i.e. weakly repelling, pseudopod tend to cluster, while cells with a large, i.e. strongly repelling, pseudopod tend to collectively align [1]. The cells naturally arrest at a high density. At intermediate to high density, the cells develop strong density waves [1-2], analogous to traffic jams in traffic models. The model also reproduces the typical growth characteristics of cell colonies [3], see figure. At early times, the colonies grow exponentially in time. At long times, the colony boundary moves at a constant speed, determined only by the maximum migration speed of a single cell and independent of the proliferation rate.

We acknowledge support by the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) KAKENHI Grant No. 26610131, 16H00765, and 17H01083.

【参考文献】

- (1) S.K. Schnyder, Y. Tanaka, J.J. Molina, and R. Yamamoto, Scientific Reports 7, 5163 (2017).
- (2) M. Campo, S.K. Schnyder, J.J. Molina, T. Speck, and R. Yamamoto, Soft Matter 15, 4939–4946 (2019).
- (3) S.K. Schnyder, J.J. Molina, and R. Yamamoto, arXiv:1810.00546.