飛び移り座屈による球状シェルの跳躍ダイナミクス

(慶應義塾大学)阿部 宝、清水 柊平、中原 行健、髙橋 英俊、石上 玄也、佐野 友彦

【はじめに】近年、飛び移り座屈を利用したソフトロボットが注目を集めている[1,2]。飛び移り座屈とは、安定状態にある構造物が不安定な状態を飛び越えて、別の安定状態へと素早く変形することである。飛び移り座屈を利用することで、素早く大きな変形や力を生み出すことができる。多様なソフトロボットが提案されている一方で、その機構の最適化の指針は未解明な部分が多い。そこで本研究では跳躍するソフトロボットの基本的な仕組みを明らかにするために、薄い半球状シェルの剛体基盤上での跳躍実験を行った(図, a)。

【結果と考察】空気圧を用いてシェルの変形を制御できるように実験装置を作製した。跳躍実験中のシェルを真下から撮影し、画像解析を行うことでシェルと基盤の接触状態を調べた(図, b)。実験の観察から、最大跳躍高さHにはシェルが反転状態から自然状態へと復元することによる寄与H_ℓと、基盤から離れた跳躍の寄与H_jの 2 種があるとわかった(図, c･d, 挿入図)。H_ℓは座屈した状態と自然状態の間の高さの差であり、単純な幾何学形状の考察から、理論式が予測できる。また、接触力学に関する考察[3]から、シェルに蓄えられた弾性エネルギー量を見積もった。蓄えられた弾性エネルギーが重力による位置エネルギーに変換されるとすると、H_jのスケーリング関係式が得られる。得られた2つの理論式は、それぞれ実験結果とよく整合することがわかった(図, c･d)。半球状シェルは一見して単純な構造を有するが、その跳躍ダイナミクスの背後にはシェルの弾性と幾何学の相互作用が複雑に絡み合っているということがわかった。

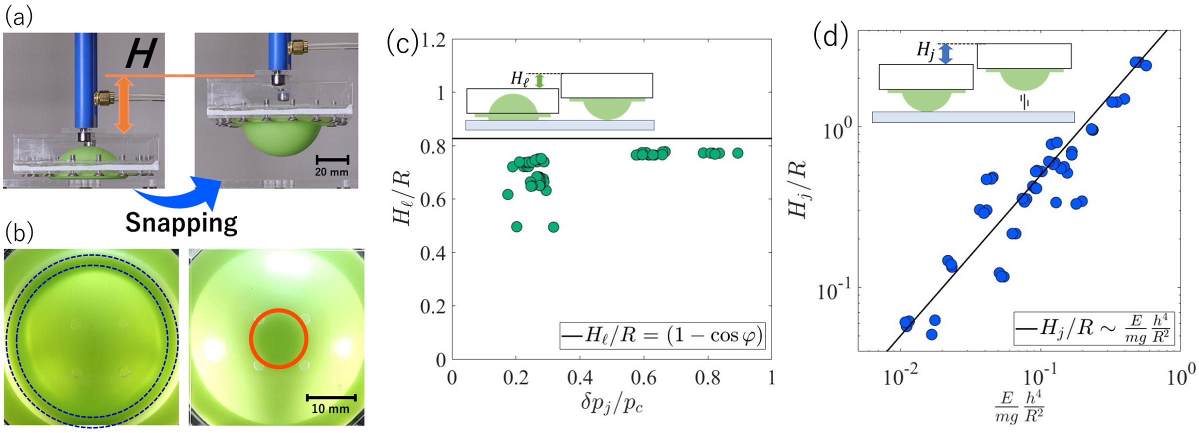


図 (a)飛び移り座屈による半球状シェルの跳躍挙動。空気圧を利用して飛び移り座屈を起こすことで、基盤を蹴って跳躍する。シェルの曲率半径をR、厚さをh、頂点からクランプまでの極角をφとして、最大跳躍高さHを測定した。(b)シェルと基盤の接触部分の時間変化。初めは円環状に接触し、跳躍に伴い円板状の接触へと変化する。(c)シェルが自然状態へと復元することによる寄与H_ℓの実験結果と理論式。横軸は跳躍直前にシェルに加わる気圧差δp_jを、シェルが座屈する臨界圧力p_cで無次元化した値である。シェルを跳躍前に大きく凹ませると、理論式に近い実験結果が得られる。(d)基盤から離れた跳躍の寄与H_jの実験結果と理論式。シェルの材料のヤング率をE、シェルにかかる正味の重量をmgとした。

【参考文献】

[1]B. Gorissen et al., ‘Science Robotics’, vol. 5, 42, (2020)
[2]P. Rothemund et al., ‘Science Robotics’, vol. 3, 3, (2018)
[3]B. Audoly & Y. Pomeau, “Elasticity and Geometry”, ‘Oxford University Press’, (2010)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

並列接続した弾性管内振動流の同期現象の流体シミュレーション

（千葉大院理）荒谷 優基, 伊藤 弘明, 北畑 裕之

【はじめに】

複数の非線形振動子を相互作用させると、振動子間の位相差が一定になる同期現象が広く観察できる。たとえば化学反応系では BZ 反応、生物系では心筋細胞、流体系では精子の鞭毛運動などで観察することができる。特に流体系では、空間的に近くに配置することで流体を介して相互作用することができ、数多くの同期現象が報告されてきた。これらが発現する同期モードは非自明であることが多く、非線形物理学の興味の対象となっている。

流体振動子系の一つとして、側面から外圧のかかった弾性管の中に流体を流すと、弾性管の変形と流体の運動が協同して自励振動する[1]。これは血圧測定時のコロトコフ音などに対応するといわれている。このような弾性管内流れを研究する際に、弾性管の両端を二つの剛体管で固定した Starling Resistor がよく用いられてきた。また Starling Resistor に対する理論的なアプローチのために二次元流体モデルが提案されており、流体構造連成シミュレーションを用いて管の弾性係数依存性などの観点から調べられている[2]。

本研究では、この Starling Resistor の二次元流体モデルを二つ並列に連結させ、二つの振動流が合流するような系を構築し、この系の示す非線形ダイナミクスについて調べた。特にこの系は二つの振動流が流体相互作用しているとみなすことができるため、同期現象の観点から議論した。また変形領域から管の合流地点までの距離 d をパラメータとして変化させ、安定な同期モードの d 依存性を明らかにした。

【結果と考察】

$d = 5$ のときのシミュレーション結果を図 1. (a), (b)に示す。初期条件に依存して同相同期と逆相同期の両方が観察されたことから、これらの同期モードが双安定であることがわかった。d を変化させたときの安定な同期モードのパラメータ依存性を調べ、d が大きい場合（$d \geq 8$）は同相同期のみが安定、中程度の場合($0.7 \leq d \leq 7.5$)は同相同期と逆相同期が双安定であることがわかった。d が小さい場合($d \leq 0.6$)は相互作用が小さいため、安定解に収束するまでに時間がかかり、シミュレーションの終状態からは安定な同期モードがわからなかった。そこで様々な初期条件での位相のダイナミクスを観察したところ、d が小さい場合に安定な同期モードが同相同期のみであることがわかった。本発表ではこれらの結果に加えて、同期モードが転移する際の分岐構造についても詳しく議論する。

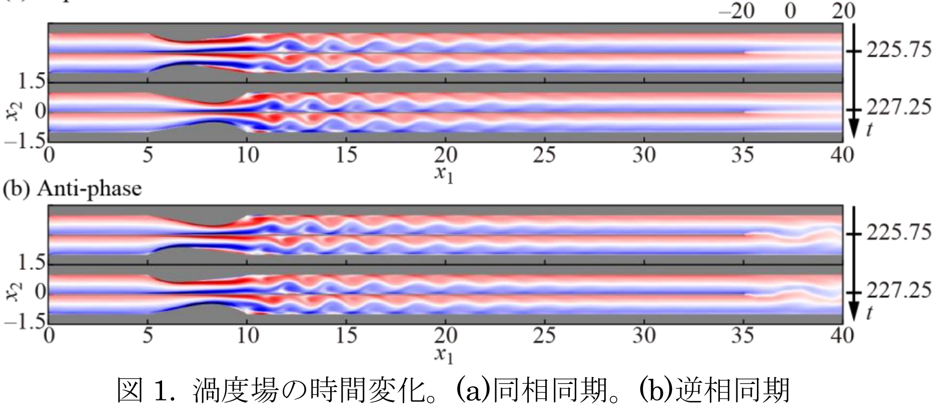


図 1. 渦度場の時間変化。(a)同相同期。(b)逆相同期

【参考文献】

(1) M. Heil and A. L. Hazel, Annu. Rev. Fluid Mech. 43, 141 (2011).

(2) T. J. Pedley, J. Biomech. Eng. 114, 60 (1992).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

イオン結晶型ハイエントロピー合金における拡散メカニズム

(都立大物理 1, 東大生研 2) 石川 陸矢 1, 高江 恭平 2, 水口 佳一 1, 栗田 玲 1

【はじめに】

近年、5 種類以上の元素がほぼ等量の組成で含まれている多成分系合金(ハイエントロピー合金:HEA)は材料科学分野を中心に注目されている[1]。HEA は多成分系であることに由来する 4 つの効果(ハイエントロピー効果、格子ひずみ効果、遅い拡散効果、カクテル効果)を持ち、それらの効果により優れた機械特性や機能性が発現すると考えられている[1]。特に、拡散や原子の易動度は材料の変形強度や安定性とも関係していると言われており、それを理解することは重要である。しかしながら、多成分系における拡散メカニズムについては明らかになっていない。

そこで、我々はイオン結晶型 HEA である $AgInSnPbBiTe_5$ に着目した[2]。この物質では、主となる原子間相互作用がクーロン力と排除体積であるため、エバルトの方法を用いた古典分子動力学シミュレーションを行い、原子拡散挙動について調べた。

【結果と考察】

$AgInSnPbBiTe_5$ について拡散メカニズムを調べたところ、あるカチオンが格子間位置に移動し空孔を作る格子欠陥(フレンケル欠陥[3])を自発的に作ることがわかった[図 1 (a)]。さらに、フレンケル欠陥の形成によりカチオン全体の拡散が誘起された。また、フレンケル欠陥は主に電荷の小さいカチオンである Ag^+ や In^+ によって形成されているとがわかった[図 1 (b)]。以上の結果から、電荷の小さいカチオンがカチオン全体の拡散を促進すると考えられる。

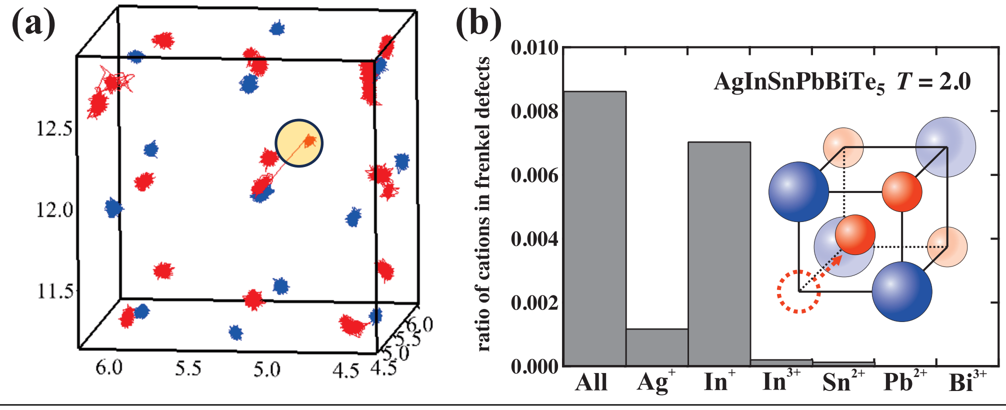


図 1 (a) フレンケル欠陥を作る粒子を含む 1 格子分の粒子の軌道。赤線、青線、丸はそれぞれカチオン、アニオン、フレンケル欠陥の位置に対応する。あるカチオンは格子間位置に移動し、空孔を形成している(フレンケル欠陥[3])。(b) フレンケル欠陥を形成するカチオンの割合。電荷の小さいカチオンがフレンケル欠陥を多く形成している。

【参考文献】

[1] 乾晴行編著 “ハイエントロピー合金”, 内田老鶴圃 (2020).

[2] Y Mizuguchi, *et al. Mater. Today Phys.* **32**, 101019 (2023).

[3] J. Frenkel, *Zeitschrift für Physik* **35**, 652 (1926).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

液体-液晶共存状態における高分子の輸送現象と配向場形成

（立命館大・理工）安藤瞳、登弘樹、伊藤裕貴、吉岡潤、深尾浩次

【はじめに】濃度勾配の発現は形態形成において重要な役割を担う。例えば生物の発生において、タンパク質の濃度勾配が発生し、それらが胚葉形成や器官形成、そしてそれを統合する個体発生に大きな影響を及ぼすことが知られている。本研究では、生体構造の構成要素である液晶と高分子の混合系における秩序構造形成に着目する。我々は、温度勾配の介在下、液晶秩序が徐々に形成される過程において、液晶試料内部に分散した高分子が集積し、特徴的なパターンを形成することを発見した。この高分子の輸送現象のメカニズム、および高分子の濃度場が液晶の配向形成に与える寄与を明らかにすることを目的として、蛍光高分子を分散させたネマチック液晶相の液滴を偏光および蛍光顕微鏡を用いて観察した。

【結果と考察】液晶試料として、ネマチック液晶相を示す 7CB、およびこれに蛍光高分子(poly(tris(2.5-bis(hexyloxy)-1.4-phenylenevinylene)-alt-(1.3-phenylenevinylene))) を 0.01 wt%程度添加した混合物を用いた。試料を、垂直配向処理を施した２枚のガラス基板で挟み、厚さ 100 μm の円柱状の滴を作成した。これの温度を上昇させて液体状態にした後、温度勾配を印加しつつ徐冷を施した。試料の低温側から液晶秩序が徐々に形成される過程に置いて、液晶の配向場と高分子の濃度場を、偏光および蛍光顕微鏡観察によって解析した。偏光顕微鏡観察において、徐冷の際に十字状の組織が発現したが、これは中心に点欠陥を有した円対称な配向場が形成されたことを示唆する。いくつかの小さな液滴で、点欠陥が温度勾配下の徐冷によって液滴の中心から移動し、再び中心に戻る現象が見られた。図１に液滴の中心温度 T_0 ＝42.0 ℃における液滴半径 R と液滴中心からの点欠陥のずれR_cの関係を示す。これにより、R_c/Rは液滴のサイズに依存しており、かつ蛍光高分子の有無によってサイズ依存性が変化することが判明した。一方、蛍光顕微鏡観察の結果、高分子がリング状に集積する現象、およびリングが複数個の点に分裂する現象が観測された。図２に、液滴の中心温度 T_0 ＝ 42.0 ℃における蛍光顕微鏡、偏光顕微鏡の観察結果を示す。これらの結果は、点欠陥は蛍光高分子の集積個所を避けて移動すること、また高分子の局所的な濃度上昇が配向場の乱れを引き起こしていることを示唆している。

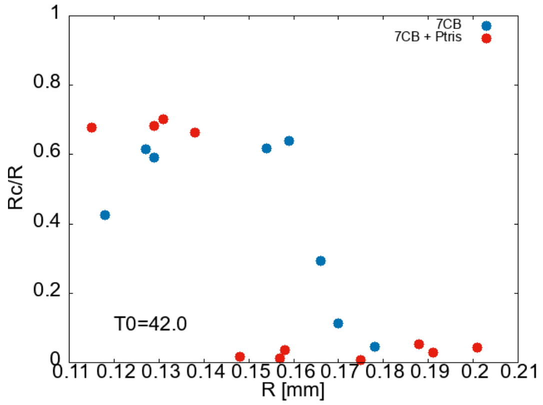


図 1，液滴の中心温度 T_0 = 42.0 ℃における、液滴半径 R と液滴中心からの点欠陥のずれ

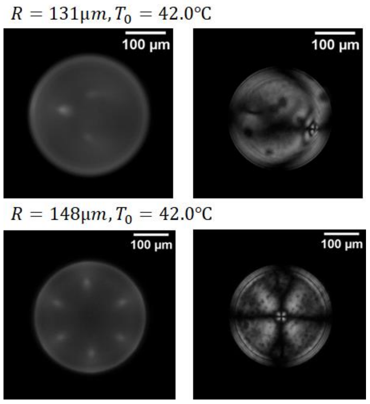


図 2，液滴の顕微鏡観察結果（左は蛍光、右は偏光顕微鏡による観察）

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

樹皮パターンの形成機構に関する研究

（東京大学大学院農学生命科学研究科）上信　陽太郎，山口　哲生

【はじめに】

樹皮は同化物質の運搬や貯蔵、通気、樹体の保護などを担う重要な組織である。樹皮のさまざまな模様（パターン）に関しては、死滅した組織である外樹皮やコルク組織が、樹幹の肥大成長によって接線方向に引張を受け軸方向に裂けることによって形成されると理解されてきた。しかしながら、これだけでは縦割れ模様以外に対する説明は不十分である。また、力学的な観点からの樹皮の模様形成に関する研究例は極めて少ない[1]。そこで本研究では、さまざまな樹皮の模様形成を、数理モデルの構築およびそれを用いた数値シミュレーションを通して、樹皮組織の物性と樹皮の力学的状態から統一的に説明することを目的とした。

【結果と考察】

樹皮の模様形成に関するモデル化の第一段階として、断面における樹皮の変形を記述する 2 次元モデルを作成した。ここで樹皮模様は、(i)樹幹の成長、(ii)樹皮の自然長増大、(iii)樹皮の自発曲率の変化という、3 つの特徴的なパラメータの競合によって決まると仮定した。薄膜の弾性変形[2]や剥離、破壊を考慮した数値シミュレーションを行ったところ、図 1 のように、実際の樹木で観察される、縦割れ・座屈・剥離・カール模様を再現することができた。

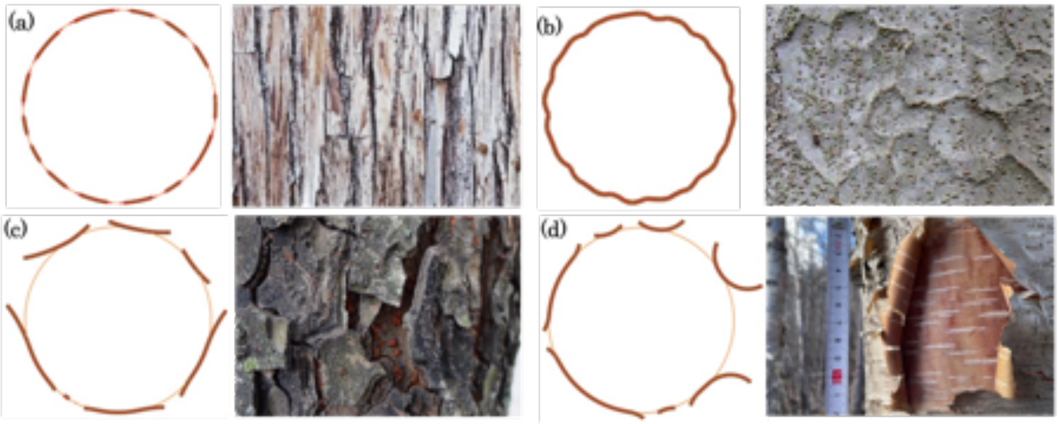


図 1：樹木の断面における樹皮模様、(a)縦割れ、(b)座屈、(c)剥離、(d)カール

本モデルによれば、樹幹の肥大成長が支配的な場合には縦割れのみが生じ（図 1(a)）、そこに自発曲率増大との競合が加わることで剥離（図 1(c)）やカール（図 1(d)）、樹皮の自然長増大が支配的な場合には割れが起こらず座屈が起こる（図 1(b)）。このように、実際の樹木のパラメータを考慮することで、多様な樹皮模様を表現できることがわかった。また、パラメータを決定するために樹皮の各組織の力学試験を行なった。現在は幼木から老木まで一生の樹皮模様の変化を表現するために、多層構造でのモデル化に取り組んでいる。

【参考文献】

(1) H.Dale *et al.*, *Annals of Botany*, 114, 629, (2014)
(2) T.Sano *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, 118, 178001, (2017)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

粒子集団の擬 2 次元流れに現れる変形配向秩序

（千葉大学大学院理学研究院）伊藤 弘明，荒川 陽輔，北畑 裕之

【はじめに】

長距離の相互作用が働く多体粒子系は、ダストプラズマ[1]や外場駆動されるコロイド集団[2]、流動するマイクロ液滴集団[3]、血管を流れる血球細胞集団[4]など、自然界に遍在的する。特に、液滴や細胞などの例はそれぞれの粒子が変形能をもつため、粒子がどのように相互作用しながら集団的に流れ、変形するのかは未解明であり、流動と変形がカップルした系の振る舞いを理解することは懸濁液系における重要な問題となっている。

【結果と考察】

本研究では、図 1(a)に示す均質な擬 2 次元マイクロ液滴を形成するマイクロ流体デバイスを用いた実験と解析を行い、相互作用しながら時間発展する系の構造解明を目指した。この系は低レイノルズ数の擬 2 次元ストークス流れで特徴付けられ、個々の粒子（マイクロ液滴）は近似的に他の粒子がつくる双極子型流れ場の重ね合わせの下で移動と変形を示す。我々は、2 次元テンソル配向秩序を用いて粒子周りの変形場を解析し、図 1(b)に示すような、角度方向に 3 回回転対称かつ動径方向に距離の–3 乗に比例する大きさの変形配向秩序が現れることを明らかにした。さらに、粒子密度が高くなると、この変形配向秩序構造は非自明に乱れる。我々は、この高密度条件における変形場は多体粒子間の配置構造や粒子間相互作用から説明できることを明らかにした。発表では、流体相互作用と排除体積相互作用の観点から実験で見られた変形場の回転対称性や粒子密度依存性のメカニズムを議論する。

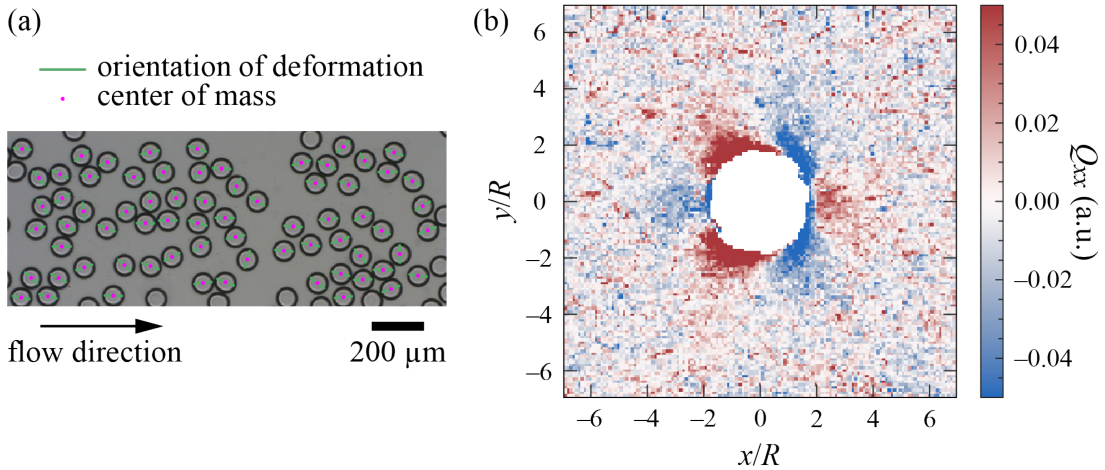


図 1：(a) マイクロ液滴集団の擬 2 次元流れ。(b) 液滴周りの変形配向秩序テンソル場の例。

【参考文献】

(1) G. E. Morfill and A.V. Ivley, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1353 (2009).
(2) S.-R. Yeh, M. Seul, and B. I. Shraiman, *Nature* **386**, 57 (1997).
(3) T. Beatus, I. Shani, R. H. Bar-Ziv, and T. Tlusty, *Chem. Soc. Rev.* **46**, 5620 (2017).
(4) T. W. Secomb, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **49**, 443 (2017).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

折り紙の瞬間的な座屈

（慶應義塾大学）海老根優菜、佐野友彦

【はじめに】折り紙は展開構造や膨張構造の基本的な仕組みとして工業的に注目を集めている。折り方を工夫することにより、自然な材料には見られない人工的な力学特性が実現できる。このことから、折り紙はメカニカルメタマテリアルとして捉えることができる。例えば、円筒シェルを圧縮した際の最低次の座屈モードであるダイヤモンドパターン(吉村パターン)に着想を得た折り目構造は圧縮力に対して強く、缶の側面のデザインなどに活用されている。近年、円錐形のシェルに鉛直方向から撃力を加えると、同様のパターンがロバストに出現することが報告された[1]。しかし、ダイヤモンドパターンを正確に発生させるメカニズムは完全には理解されておらず、シェルの力学理論や実験に基づく解析が必要とされている。

【結果と考察】本研究では、Gottesman らの研究に着想を得て、フィルムで作成した円錐と角錐に衝突実験を行い、頂点に撃力を与えた際のシェルの座屈パターンの解析を行った。撃力を与えた後のサンプルにはいずれもダイヤモンドパターンが現れた。パターンの特徴を定量的に明らかにするために、試験後のシェルを平面に展開し、3D 測定機を用いてパターンの周方向の対角線l_θと頂点からの距離Rを測定した。先行研究の通り、円錐ではl_θはRに対して増加する、つまり頂点から離れるにつれてダイヤモンドパターンの大きさが増加することが再現できた。四角錐は円錐と異なり折り目がついているが、円錐と同様の依存性が見られた。一方で三角錐はl_θとRの間の相関関係は明確には見られず、折り目の構造がダイヤモンドパターンの発生に重要な役割を果たすことが期待できる。衝突の瞬間のシェルの変形の様子とシェル内圧の時間変化を測定するために、ハイスピードカメラで撮影し、同時に内圧測定を行った。測定結果を照らし合和すと、円錐と角錐の両方とも、元の高さの半分程度まで座屈した時に内部圧力が最も高くなることが分かった。円錐と角錐の最大圧力に達する時刻Tに差が生じていることから、角錐は折り目の影響により円錐よりも座屈しやすいことが示唆される。

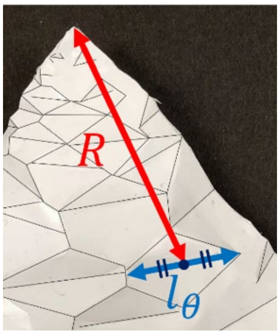


図 a

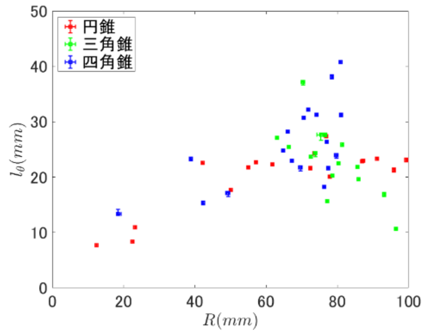


図 b

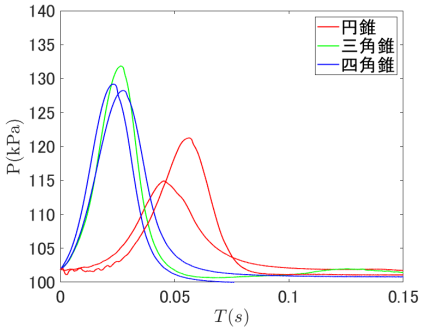


図 c

図 a 座屈後の円錐を展開したもの。菱形の周方向の対角線に折り目が入ったパターンが連続的に生じる。l_θとRを図のように設定した。

図 b 折り目の周方向の長さl_θと頂点からl_θの中点までの距離Rの関係。

図 c 円錐、三角錐、四角錐の座屈時の圧力変化。円錐と角錐では内圧の時間変化が異なる

【参考文献】

(1) O. Gottesman, E. Vouga, S. M. Rubinstein, and L. Mahadevan, “Localized patterns in crushed conical shells,” Europhysics Letters, vol. 124, p. 14005, nov 2018.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Pinch offにより強制誘起された泡沫の毛管上昇

(都立大　物理) 遠田　幸斗，栗田　玲，谷　茉莉

【はじめに】

水に親水性の毛細管を差し込むと、液体が管内を上昇して液面より高くなることが知られている。これは液体と空気、毛管の間の界面張力によって起こる現象で、これまでに多くの研究がなされている（1）。界面活性剤溶液に気泡が含まれている時、毛管上昇とともに気泡が集まり泡沫化し、目詰まりなどの問題を引き起こすが、毛管内の泡沫挙動についての研究は数少ない。通常の液体と異なり、泡沫は気泡と液体の高充填混合系であり、弾性を有する。また、泡沫内部では排水が起こるなど、泡沫特有の性質による影響が表れると予想される。

【結果と考察】

本実験では、水の毛管長約 **1.5 mm** よりも半径が大きな場合でも泡沫が上昇することがわかった。さらに、管の直径が大きく、泡沫が自発的に上昇しない場合でも、管を泡沫から引き抜く瞬間に、管内の泡沫が上昇する様子が観察された（図１）。これは、管を引き抜く際にピンチオフした泡沫が管に付着し、これが泡沫の表面張力によって毛管上昇した為だと考えられる。この現象を繰り返し用いると、泡沫に管を差したのみの場合よりも泡沫が高く上昇すると予想される。そこで、我々は、管を泡沫に定速で周期的に抜き差し可能な実験装置を構築し、泡沫の上昇の様子を観察した。その結果、予測通り、管を抜き差しした場合の方が泡沫は高く上昇することがわかった。また。管の引き抜き速度が大きいほど。ピンチオフする泡沫体積が大きいことがわかった。さらに，ピンチオフ後の泡沫の毛管上昇のダイナミクスを調べた。当日は、これらの詳しい実験結果と考察を発表する。

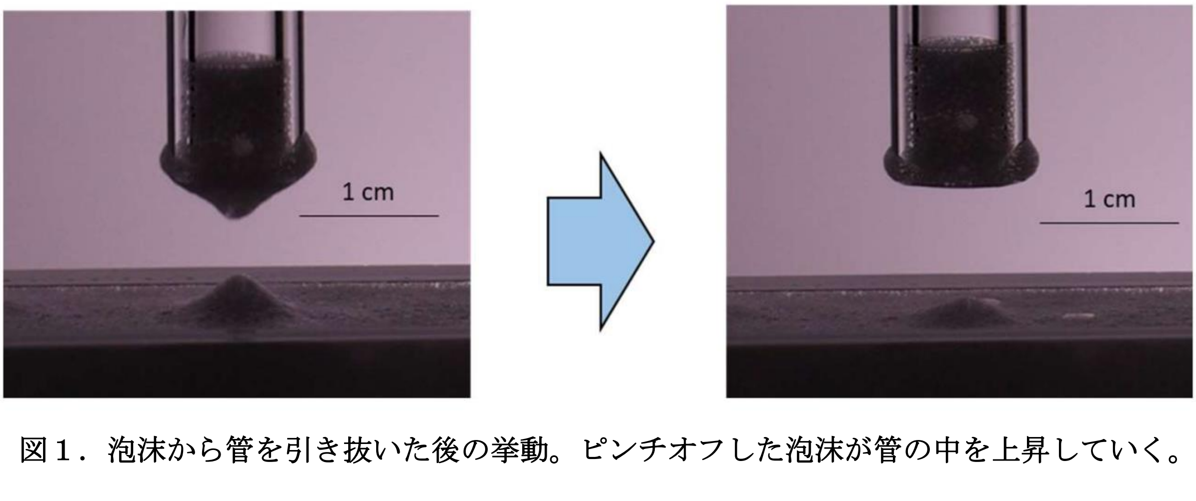


図１．泡沫から管を引き抜いた後の挙動。ピンチオフした泡沫が管の中を上昇していく。

【参考文献】

(1) P. G. de Gennes, F. Brochard-Wyart & D. Quéré, 奥村 剛(翻訳)「表面張力の物理学」吉岡書店 (2008).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

全個体追跡に基づく遊泳細胞集団のダイナミクスの測定と解析

（京都大学大学院 理学研究科）○奥山紘平, 市川正敏

【はじめに】

自己駆動粒子の集団運動の研究は、Vicsek モデルを端緒として、アクティブマターの分野で中心的な位置を占めている。特に、遊泳細胞やヤヌス粒子などのマイクロスイマーの集団運動では、排除体積効果に加えて流体相互作用も主要な役割を果たすことが明らかになってきた[1]。たとえば、べん毛による駆動力で遊泳するバクテリアの濃縮系では、細胞の周りに誘起される流れが増幅され、乱流のようなパターンが現れることはよく知られている。しかし、細胞集団の実験測定においては高速で泳ぎ回る細胞一つ一つの識別が困難であり、一細胞レベルの運動のデータの取得は十分希薄な場合を除いて前例がなかった。したがって、細胞種に固有の運動の特性や相互作用の詳細が、集団としての運動相の転移にどのように影響するか、という点については実験的に十分に調べられていなかった。

【結果と考察】

本研究では、単細胞微生物であるテトラヒメナの濃厚懸濁液における集団運動の観察と解析を行なった[2,3]。我々は気液界面上の 2 次元運動を顕微鏡で撮影し、機械学習に基づく画像解析[4]を用いることで運動する全細胞の自動検出に成功した[図 1]。そこで希薄状態から最密充填近くまでにわたる細胞濃度のサンプルから運動データを取得し、その詳細な解析によって集団ダイナミクスの密度依存性を調べた。まず、細胞の軌道から計算された中間散乱関数$F_s(k,t)$では、気体的な振る舞いから液体的な振る舞いへの移行が見られた。また、同時刻の 2 体の空間速度相関においても、密度の増加にしたがって相関長が増加するとともに、細胞が進む向きについて顕著な異方性が現れた。この相関長の増加傾向は、細胞集団におけるダイナミックなクラスター構造の解析によっても確かめられた[図 2]。さらに、各細胞について定義される局所充填率の分布によって密度の揺らぎを定量化したが、運動性誘起相分離（MIPS）のような巨視的な高密度相は見られなかった。本発表ではこれらの結果を中心に、今後の進展についても議論する。

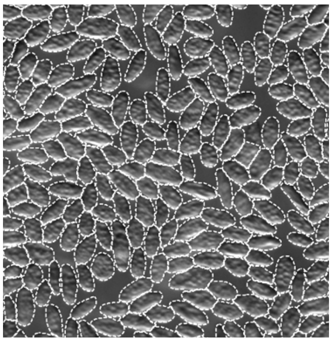


図 1：画像解析の結果.

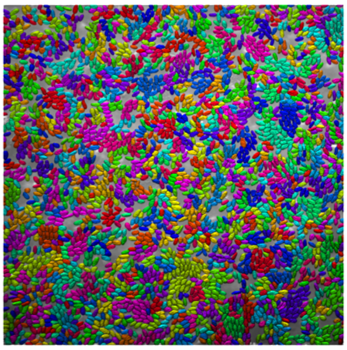


図 2：細胞集団における クラスター構造.

【参考文献】

(1) K. Qi, *et al.*, *Communications Physics*, 5(1), p. 49 (2022).

(2) 奥山紘平, 市川正敏, 日本物理学会 第 78 回年次大会（2023 年）, 17aB202-2

(3) 奥山紘平, 市川正敏, 日本流体力学会年会 2023, G9-04

(4) M. Pachitariu and C. Stringer, *Nature Methods*, 19(12), pp. 1634–1641(2022).

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

液体金属付与フィルムへの近赤外光照射による水面上遊泳制御

（富山県大工）○遠藤 洋史・旅 みなみ・森林 広大

【はじめに】

水面歩行・推進を可能にする小型ロボティクスの開発には, mm～cm スケールの様々な昆虫の動的性能が手本となる. 例えば, ある種のハムシの幼虫は体を湾曲させることでメニスカスを上昇し陸へと到達する. この場合, メニスカス面の変形による横毛管力が駆動している. 一方, 液体金属(LM：Liquid Metal)は優れた光熱変換特性を有していることから, 光熱療法など主にメディカル面での応用が期待されている. しかしながら, この特性を小型ロボティクス等の動力源に活用した研究例は少ない. そこで本研究では, 湾曲フィルムと液体金属含有フィルムを接着させ, 当該融合フィルムへの近赤外(NIR)光照射によるマランゴニ推進およびメニスカスクライミングについて水面上挙動の動力学解析から検証した.

【結果と考察】

実験として先ず, 液体金属 EGaln(75.5 wt % Ga and 24.5wt % In)をエタノールと混合し, 超音波処理を経て微粒子化した. 次に液状 PDMS を先の EGaln 分散液に加え, 疎水処理を施した Si 基板にスピンコートした. 熱硬化後に Si 基板から剥離し, 液体金属含有 PDMS フィルム(膜厚: 約 70 μm)を得た. また湾曲 PDMS フィルムは 3D プリンタで作製したモールドから離型し, 曲率の異なる 2 種類(曲率 0.35 cm^{-1}(Fig.1 (a)), 0.70 cm^{-1} (Fig.1 (b)))を得た. なおフィルム長・幅・膜厚は全て 30 mm×5 mm×1 mm と統一した. またキャスト法により平坦フィルムも同様の大きさで用意した. 最後に LM フィルムを小片切り取り, 各フィルム端部に接着した. その後フィルムを壁面から 25 mm 離した水面上に静置させ, 三相接触面を狙い側方より近赤外光(波長:808 nm)を照射してマランゴニ推進を誘起した. 15 mm 推進したところでファイバーを離し, 自発的なメニスカスクライミング挙動を観察した. 併せてプラズマ照射による親水処理前後でも比較した.

その結果, 平坦フィルムはメニスカス壁面に近づくと反発した. 一方, 湾曲フィルムは共に壁面近くで加速しメニスカスクライミングを達成した. 親水処理前では, 両湾曲フィルムの推進挙動に大きな差異はなかったが, 処理後では 0.35 cm^{-1} フィルムは推進速度が増大し, 0.70 cm^{-1} フィルムは大きく減衰した. 速度解析を行った結果, 平坦フィルムは一定速度で推進しているのに対して, 湾曲フィルムは共に壁面に近づくにつれて指数関数的に上昇していくことが分かった. 推進性の違いは, メニスカス高さや角度が関与していることが示唆された. なおサーモグラフィー解析から, 全フィルムにおいて端部照射位置の温度が 5～10 °C 程度上昇していることを確認した.

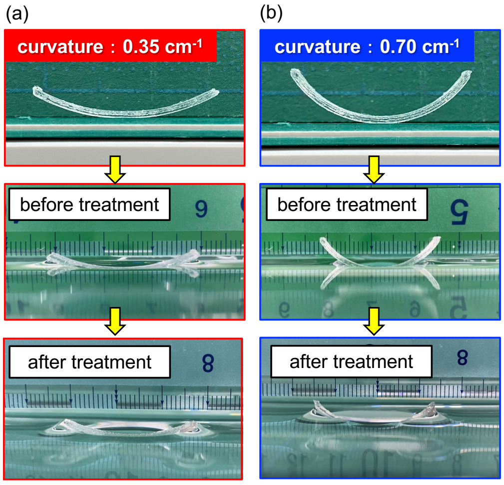


Fig.1 Photographs of (a) 0.35 cm^{-1} and (b) 0.70 cm^{-1} bent film on the desk and water surface.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

空間構造を導入したセルでゲル化により生じる流動パターン

（東理大理）氏　名　乙黒康次郎，田中駿佑，國廣美幸，石川博基，住野豊

【はじめに】

プレート境界では海洋プレートから運搬された水がシリカを含んでおり，圧力・温度条件の変化に伴い水からのシリカの析出によって媒質の透水率が変化することで，スロー地震の発生頻度を増加させることが示唆されている[1]. こうした反応によるレオロジーの変化と流動の関係を解明するために，水ガラス-金属塩水溶液などの反応により沈澱物を形成する 2 流体系による注入実験が行われている[2]. 片方の流体をヘレショウセルと呼ばれる擬二次元セルに充填し，他方の流体を注入することで，反応と流動が競合する系が実現される．過去の研究においては 2 流体系が主に用いられており，反応によりフィラメント状の流動が生じることが報告されているが，土壌の岩石のような障害物の影響は加味されていない.

本研究では，臭化セチルトリメチルアンモニウム(CTAB)水溶液をヘレショウセルに充填し，サリチル酸ナトリウム(NaSal)水溶液を定常速度で注入する実験を行った．ここで，セルの厚みと同じ高さの正方格子状の柱を導入し，柱の間隔を変化させて実験を行った(図 1). この結果から得られた流動様相を再現する移動界面モデルを，我妻らの研究[2]を修正する形で導入し流動の特徴を解析的・数値的に再現した.

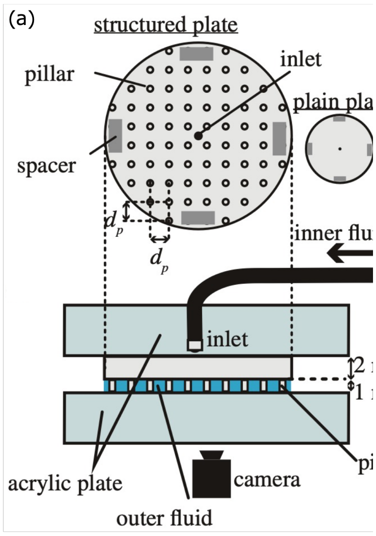


図 1 実験装置

【結果と考察】

典型的な流動パターンを図 2 に示した．柱の間隔が大きく柱による影響を受けない場合には，先行研究で報告されているように，フィラメント状になり折れ曲がりながら進展する様相が確認された．一方で，柱の間隔を小さくすると，折れ曲がりが抑制され，直進する様相が観察された．数値計算によりこれらの実験結果を再現し，折れ曲がりの機構がフィラメントの枝分かれに起因していることと，直進性の増強が生じる特徴的な柱の間隔を議論した.

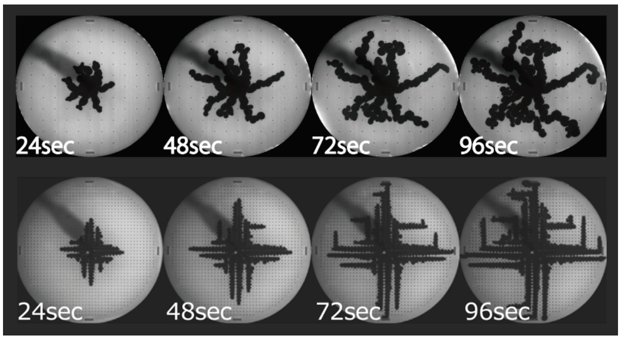


図 2 実験結果．柱間隔が大きいとき(上)と小さいとき(下)の流動様相.

【参考文献】

(1) P. Audet and R. Burgmann, *Nature* **510**, 389-392 (2014)

(2) S. Wagatsuma et al., *Phys Rev E*, **95**, 052220 (2017)

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

アガロース溶液中のコロイドの拡散運動

（京大院理）小野　基紀、山本　潤

【はじめに】

アガロースは寒天の主成分であるポリマーで、その水溶液を 30℃程度まで降温するとポリマー間の水素結合を形成してクラスターができ、高濃度ではパーコレートしゲル化する。クラスターは拡散運動をする。また、コロイド粒子は球状の粒子で、水中でブラウン運動する。

本研究では、アガロースの高分子鎖の運動とコロイド粒子のブラウン運動との動的結合を研究した。ゲル化していない低濃度のアガロース溶液にコロイド粒子(シリカナノ粒子、直径 50nm)を混合し、動的光散乱(ＤＬＳ)測定で観測した。

【結果と考察】

まず、アガロース溶液(0.05wt%)、コロイド溶液のＤＬＳ測定を 30℃で行い、いずれも拡散的な単一緩和を観測した。拡散定数はそれぞれ$D = 5.8 \times 10^{-12}, 9.4 \times 10^{-14}\ [m^2/s]$だった。これらは、それぞれコロイド粒子のブラウン運動やアガロースのクラスターの揺らぎに対応すると考える。

次に、両者の混合溶液でコロイドの濃度を変えてＤＬＳ測定を行った。コロイドが高濃度(1wt%)のときはコロイドよりやや遅い緩和($D = 3.0 \times 10^{-12}[m^2/s]$)のみが観測され、低濃度(0.2wt%)のときはコロイドよりやや遅い緩和($D = 3.0 \times 10^{-12}[m^2/s]$)とアガロースに近い緩和($D = 4.1 \times 10^{-14}[m^2/s]$)の二段緩和が観測された(図 1、2)。この違いは、コロイドが高濃度の場合は相関関数へのコロイドの緩和による寄与が相対的に高くアガロースの緩和が観測されなかった一方、低濃度の場合は相関関数へのコロイド粒子の緩和による寄与が小さくなり、アガロースの緩和も相関関数に反映されたことによって生じたと考える。混合溶液ではコロイドの緩和時間がコロイド単独溶液よりも遅くなっており、アガロースのネットワークによりコロイドのブラウン運動が制限されたと考える。

また、コロイド粒子の緩和時間の分布は、混合溶液(コロイドは高濃度)の方がコロイド単独溶液よりも広がっていた。アガロースのネットワークによりコロイドが受ける制限には分布が生じたと考える。

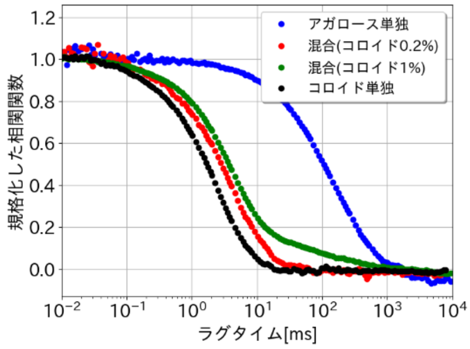


図 1　30℃でのアガロース単独、コロイド単独、混合溶液(2 種)の相関関数。レーザー光の波長は 532nm、散乱角は 27°。

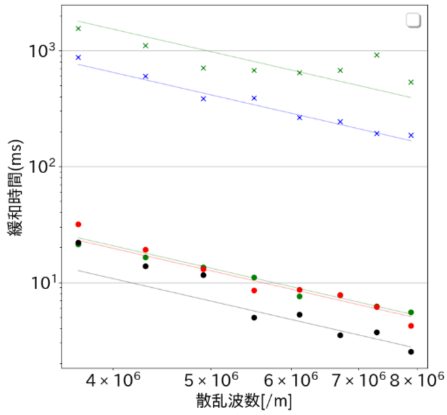


図 2　図 1 の各溶液の緩和時間の波数依存性。

×…混合(コロイド 0.2%)：アガロースに近い緩和
×…混合(コロイド 1%)：アガロースに近い緩和観測されず
×…アガロース単独
●…混合(コロイド 0.2%)：コロイドに近い緩和
●…混合(コロイド 1%)：コロイドに近い緩和
●…コロイド単独

今後はゲル化過程における動的結合のふるまいの研究を行いたい。

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Microrheology of Active Suspensions

(Dept. Phys., Univ. of Tokyo[1], IIS, Univ. of Tokyo[2])
Takahiro Kanazawa[1], Akira Furukawa[2]

[Introduction]

In active suspensions of pusher-type microswimmers, like E. coli, an anomalous reduction in viscosity is frequently observed (1). Such a rheological anomaly can be attributed to the weak orientational order of the microswimmers along the extension axis of an externally imposed flow field (2). For a deeper understanding of the underlying physical mechanisms behind this phenomenon, a comprehensive analysis of the local viscoelastic properties is essential. One promising approach for this is microrheology, an experimental technique that measures rheological properties of a medium by tracking the motion of small probes. However, there remains ambiguity regarding whether the viscoelasticity determined by microrheology is identical to the material's intrinsic bulk viscoelasticity in many soft matter systems.

[Results and Discussion]

We perform hydrodynamic simulations of a dragged probe particle in suspensions of rod-like pushers (Fig. 1(a)) (3). Remarkably, the friction coefficient in the active suspensions is lower than in the bare solvent for relatively small drag forces with HIs (Fig. 1(b)). The mechanisms of the reduction can be explained in terms of local swimmer states around the probe particle and the subsequent net force induced by the swimmers. Furthermore, the magnitude of the reduction varies with the probing conditions (Fig. 1(b), (c)). This indicates that microrheology is sensitive to local probing details.

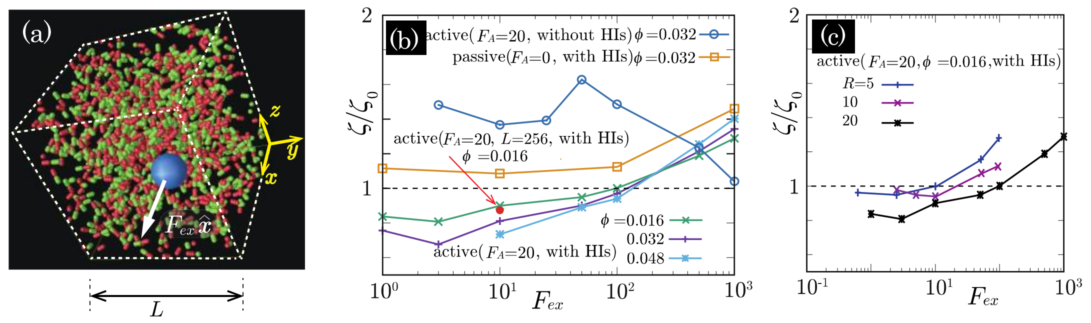


Fig. 1: (a) A probe particle, immersed in active suspensions, is dragged along the x-direction by a constant force $\boldsymbol{F}_{ex}$. (b) The friction coefficients ζ/ζ_0 vs. $\boldsymbol{F}_{ex}$, where ζ_0 is a friction coefficient in the bare solvent. (c) Dependence of the friction coefficients on probe radius $\boldsymbol{R}$.

[References]

(1) D. Saintillan, Annu. Rev. Fluid Mech. 50, 563 (2018).
(2) H. Hayano and A. Furukawa, Phys. Rev. Research 4, 043091 (2022).
(3) T. Kanazawa and A. Furukawa, submitted.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

数値シミュレーションによる土壌中の根の引き抜きに関する解析

農学生命科学研究科生物材料科学専攻　勝山慧士

【はじめに】

地球温暖化や度重なる環境変動による局地的豪雨や台風などによって、土壌の表層崩壊や風倒木などの被害が近年多発している。一方森林植生は、地中に張り巡らされた樹木根によってこうした災害の防止への働きに貢献していることが知られている[1]。しかし、掘り取りに労力や時間が掛かる等の研究対象としての扱いの難しさから、幹や葉などの地上部に比べ地中の樹木根の研究は立ち遅れているのが現状である。そこで、本研究では数値シミュレーションを用いた解析により、土壌中の根の引き抜きにおける力学的なメカニズム解明に取り組む。

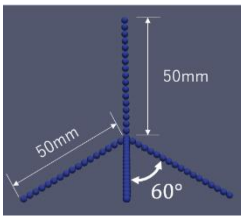


図 1：根のモデル

【結果と考察】

1.　乾燥、及び湿潤状態を想定したシミュレーション

土壌中の根のモデルとして、直径 2.83mm の粒子をつなぎ合わせて分岐角度 60°の 4 分岐モデルを作成した。土壌のモデルとしては、直径 2.83mm と 2mm の粒子を 3:7 の割合で使用した。約 10 万個の粒子の中に根を配置し、1mm/s の速度で引き抜きのシミュレーションを行った。また、土壌に見立てた粒子に対し粒子間に凝集力を新たに追加することで、湿潤状態の土壌の再現を試みた。結果の荷重変位曲線を見てみると、両条件で引き抜き開始直後に最大荷重を迎え、その後荷重は単調に減少することが分かる。また予想に反し湿潤状態の方が、最大荷重の値が小さい結果となった。シミュレーションの様子を観察してみると、固まった土壌を割って引き上がる様子や根に多くの粒子が付着するような現象はあまり確認できなかったため、粒子間の凝集力が足りないことなどが考えられる。

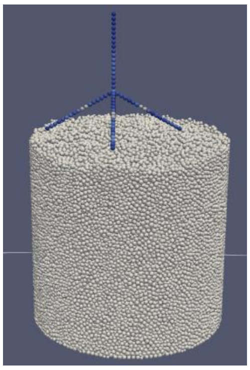


図 2：シミュレーションの様子

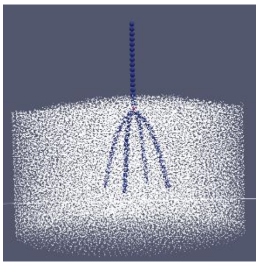
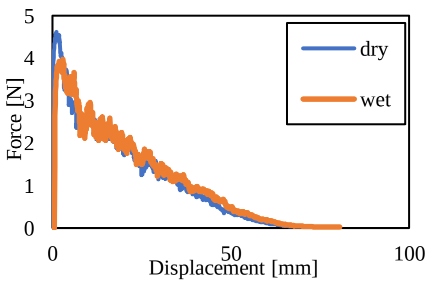


図 3：曲げの要素を入れたモデル

2.　曲げの要素を取り入れたシミュレーション

現実の草本植物の根では、引き抜かれる際にたわみの要素などが加わる。そこで、自然な根のふるまいの実現を可能にするために曲げの要素を取り入れたシミュレーションに取り組んだ。具体的には、根を構成する粒子のヤング率を $1.0\times10^{8}\rightarrow2.55\times10^{7}$ に変更、また根を引き上げるために速度を与える粒子の個数を変更することで曲げ要素の実現に試みた。



【参考文献】

1）平野恭弘、野口享太郎、大橋瑞江 (2020) “森の根の生態学” pp. 3-36. 共立出版

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

曲がった境界のある領域中の自己駆動棒の数値シミュレーション

（九州大学大学院理学府）金子　甲二郎，福田　順一

【はじめに】

濃厚バクテリア溶液中では，非定常で無秩序な渦運動が見られる．この渦運動は特徴的な長さスケールを有しており，アクティブ乱流と呼ばれている．一方，閉じ込めや障害物といった領域の制約を導入すると，バクテリアは境界付近とバルクでは異なった振る舞いを示す．アクティブ乱流固有の長さスケールに対応するような幾何学的な長さスケールを持った閉じ込めや障害物の導入を行うことで，定常的な渦運動を取り出せることが確認されている [1,2].

本研究は，分子動力学的シミュレーションを用いて，秩序的な渦運動のメカニズムの解明と曲がった境界のある領域内のバクテリアのダイナミクスの理解を目指すものである．バクテリアが互いに配向する性質や境界付近で壁と平行に向きを揃える性質を実現するために，我々はバクテリアを，排除体積を有する自己駆動棒としてモデル化した．このモデルを用いて，閉じ込めがある状況（図 1）と障害物が存在する状況（図 2）における数値シミュレーションを行った．

【結果と考察】

我々は，(1)相互作用の性質，(2)自己駆動棒の形状，(3)幾何学的な条件を変化させた時の自己駆動棒の集団的な振る舞いの変化について調べた．閉じ込めを行った際は，境界近傍で垂直に配向し動かなくなるクラスターの形成が見られた（図 1）．このようなスタックしたクラスターは，自己駆動棒が互いに重なり合えるような状況を除いて普遍的に見られた．円形の障害物がある時は，十分に長い自己駆動棒で形成される同じ向きに配向したクラスターが障害物にぶつかり，障害物周りを循環する流れを生み出すことを確認した（図 2）．しかし，短い自己駆動棒では集団運動が抑制され，気体的・ガラス的な振る舞いが見られた．これらの結果は，次元性や非等方的な相互作用が，曲がった境界のある領域における自己駆動棒のダイナミクスに重要な役割を果たしていることを示唆している．

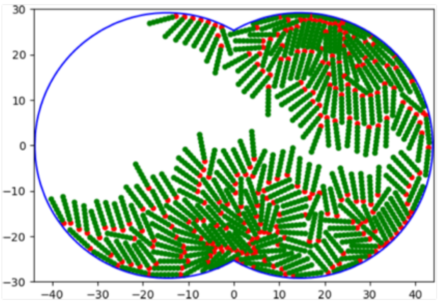


図 1: 境界付近での垂直に配向したクラスター形成

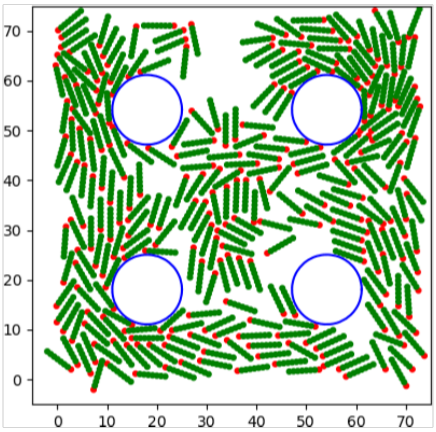


図 2: 円柱周りの過渡的な循環運動

【参考文献】

(1) Beppu, K. et al., *Soft Matter* **13**, 5038 (2017).
(2) Nishiguchi, D. et al., *Nat. Commun.* **9**, 4486 (2018).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

泡沫の浸透と排水の競合観察

（都立大物理）金田蒼依、栗田玲

【はじめに】

泡沫は液体中に気泡がつぶれながら詰まっている状態である。気泡が潰れているために泡沫の中は負圧となっており、泡沫内部に液体を吸収し、この圧力を泡沫の浸透圧と呼ぶ。泡沫はこの浸透圧によって油を吸い取るため、洗浄剤として利用される。浸透圧で液体を吸い上げる一方で、重力の影響により液体は下部へ移動し、排水される。泡沫の状況によっては泡沫外に排水が起きてしまい(図１)、泡沫内に油が吸収されることがなく、洗浄機能を果たさない。この問題を解決する上で，浸透と排水の競合関係の明確化は重要である。排水は泡沫内の水分量に関係する量であることから、泡沫が小さい、もしくは、液体分率が低い時は浸透圧が排水を上回ることが予想される。そこで、泡沫のサイズや液体分率を制御パラメータとして、浸透圧と排水の競合について調べた。

【結果と考察】

セルに泡沫を横幅一定になるように閉じ込め、鉛直方向に立て固定し、定常状態になる過程を観察した。泡沫高さと液体分率によって、泡沫外へ液体が排水する場合としない場合にわかれた（図 2）。排水の有無の転移線は$H\varphi =$（一定）で書き表せることがわかった。転移線以下では浸透と排水がつり合っており、転移線で浸透圧が最大値になる。これを利用すると、泡沫の各状態における最大浸透圧値を導出することが可能である、当日は本実験の結果と考察について話す。

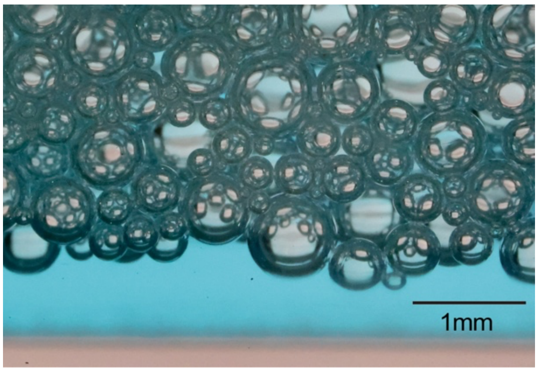


図 1 泡沫外へ排水が起きている様子

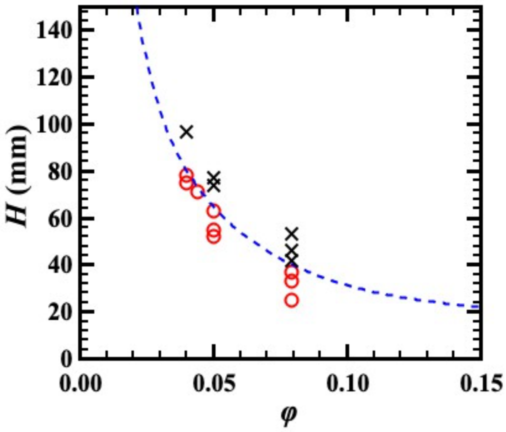


図 2 泡高さと液体分率を変化させた時の排水の状態図。×が排水し、○が排水しない結果を表す。

【参考文献】

(1) I.Cantat, S.Cohen-Addad et al. *Foam:structure and dynamics.* Oxford University Press, Oxford.(2013).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

2成分高分子水溶液の臨界挙動に対する分子量多分散性の影響

([1]東大院理物, [2]TU Dresden, [3]東大院総合文化)
加茂あかり[1], Arash Nikoubashman[2], 柳澤実穂[3]

【はじめに】

親水性高分子水溶液が示す2相分離は、ソフトマターや高分子科学だけでなく、近年生命科学においても注目を集めている。相分離の基本原理や熱平衡組成は、Flory-Huggins 理論により説明されてきた。臨界点から離れた組成条件で、2相境界に働く界面張力は平均場に従う($\gamma = \gamma_0 \varepsilon^{1.50}$)一方で、臨界点近傍では界面張力の臨界指数が理論の予想する三次元 Ising モデルの値($\gamma = \gamma_0 \varepsilon^{1.26}$)から逸脱することが報告された[1]。また、この高分子溶液からなるミクロ液滴では、熱平衡状態がバルク系とは異なることも報告された[2]。これらの理由として高分子のもつ分子量(Mw)の多分散性が注目されている。相互作用の大きさを表すχパラメーターは Mw に正比例すること、また表面への濡れ性は Mw が小さい方が高いことが指摘されているが、Mw 分散性が熱平衡状態へ及ぼす影響は未解明である。そこで本研究では、高分子の Mw 多分散性が臨界点近傍での振る舞いへ及ぼす影響を、バルクとマイクロ系で解析することを目的とした。

【結果と考察】

平均分子量 6,000, PDI=1.1 のポリエチレングリコール(PEG6k)、平均分子量 500,000, PDI=3.1 のデキストラン(Dex500k)と、PDI=2.4 の Dex20k を用いて Mw 分散の異なる系(PDI_{Dex}～3.1, 8.6)を作製した。それぞれ分離した相の屈折率と密度の測定から相図を得た結果、分散の大きい系では同じ質量分率の PEG-rich 相の Dex 濃度が上昇した(図 1(a))。2相の密度差が 0 となる濃度を臨界点濃度 C_{cr} としポリマー濃度を規格化したところ、分子量分散の大きい系ほど分離した2相の密度差と界面張力の臨界指数が上昇し、値が減少する傾向が確認された(図 1(b),(c))。濡れ性の高い Mw の小さい高分子の相界面への局在が起因していると思われる。また PEG6k-Dex500k 系に対し、蛍光染色 PEG5k と Dex500k を用いて空間分布を観察した結果、バルク系において Mw の大きい高分子は相界面から離れた Dex-rich 相の液滴中心部に局在し、Mw の小さい高分子は界面近傍まで分布する傾向が見られた(図 1(d))。脂質膜を用いたミクロ液滴内では、より強い分布差と膜への濡れが見られた(図 1(e))。本発表ではバルク、そして脂質膜によるマイクロサイズ空間での物性、相挙動への Mw 多分散性の影響を Mw 分散の異なる系を用いて評価し、その原因を議論する。

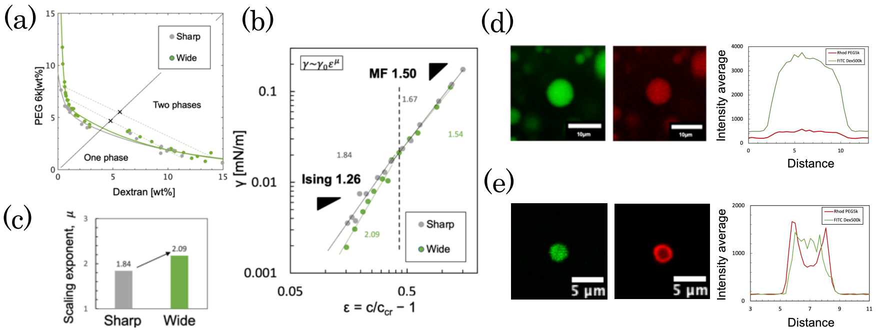


図 1. (a)Mw 分散による相図の遷移.
(b)(c) Mw 多分散性による界面張力の臨界指数の上昇.
(d)バルクでの Mw 依存の空間分布.
(e)脂質膜によるマイクロサイズ空間での Mw 依存の空間分布.
(FITC:Dex500k, Rhodamine :PEG5k)

【参考文献】

(1) Liu, et al., Frontier Chem. 7:213 (2019)
(2) C. Watanabe, et al., ACS Mater. Lett. 4, 1742-1748 (2022)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

二成分流体系における Rayleigh-Plateau 不安定性の分子動力学法研究

（慶大理工）菊地　駿太, 渡辺　宙志

【はじめに】

Rayleigh-Plateau (RP)不安定性とは、円筒状の界面が半径の2πより長い波長の擾乱が増幅し円筒が不安定となる現象である。円柱状の界面はレイリープラトー不安定によって球体へと分裂する。この現象を基にして、インクジェットプリンターの性能向上や回路印刷の合金の挙動、そして注射時の薬剤注入の挙動など、様々な応用例がある。この現象はマクロな系からミクロな系まで起こり得るため、実験や数値計算、そしてシミュレーションによって解析されている。特に分子動力学法では、分裂直前の挙動を分子レベルで調べることが出来、同時に実験で測定できない詳細な物理量を測定できるため理論との対応づけが可能である。

古典的な RP 不安定の理論として、レイリーによる解析がある。この理論では、非粘性かつ非圧縮を仮定して線型安定性解析をすることによって擾乱の不安定性の分散関係を調べた。この解析結果はマクロな円筒の系で熱ゆらぎの効果が無い時に有効である。その一方で、ミクロな系や分裂直前では熱ゆらぎや粘性の効果が出るために記述が出来ない。そのため、本研究では二成分流体系における RP 不安定性を考え、大規模な分子動力学法シミュレーションによって成長率を測定し、熱ゆらぎの影響を調べた。

【結果と考察】

二成分流体系に関するモデリングを記述する。同種粒子間としては Lennard-Jones (LJ)ポテンシャルを、異種粒子間では Weeks-Chandler-Andersen (WCA)ポテンシャルを設定した。シミュレーションのセットアップとして、事前に単成分流体で計算を行い緩和させ、円筒状の界面となるように粒子を設定した。全粒子数を 800 万、シミュレーションボックスのサイズを$(L_x, L_y, L_z) = (100,100,1000)$、温度を 0.8 として計算を行った。成長率の測定においては、図 1 のように粒子の設定の際に波数kの擾乱をかけた円筒を初期状態とした。この初期状態は、

$$r(z,0) = r_0 + \varepsilon \cos(kz) \qquad (1)$$

と書くことが出来る。ただし、周期境界条件によって$kL_z = 2n\pi$となるようなkを設定した。擾乱を掛けた円筒に対して、線型安定性解析が成立すると仮定して

$$r(z,t) - r_0 = \varepsilon \cos(kz) \exp(\omega t) \qquad (2)$$

と書くことが出来る。この時、成長率はωである。本研究では式(2)に基づいて波数と成長率の関係を調べた。発表ではこの結果が理論とどのように一致するかに関して述べる。

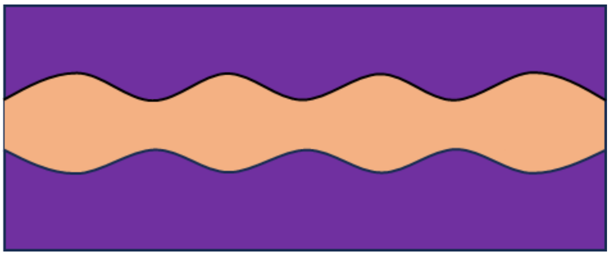


図 1 シミュレーションのセットアップ

【参考文献】

(1) Lord Rayleigh, Proc. London Math. Soc., **s1-10** 1-4 (1878)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

セルロースナノファイバー分散液の拡大流れに誘起される構造

([1]新潟大学, [2]株式会社フォトニックラティス)草野曜圭[1], 佐藤大祐[2], 牛田晃臣[1]

【はじめに】

セルロースナノファイバー (CNF)は高いアスペクト比を持ち，優れた機械的特性を示すことが知られている．したがって，CNF は繊維強化複合材料の補強用繊維としての応用が期待される．繊維強化複合材料は内部の補強用繊維の配向状態が材料の性質に強く影響を及ぼすが，これは成形時における流動によりほとんど決定する．よって，流動に誘起される繊維の状態を把握することは，非常に重要な知見となるが，伸長流動を伴う繊維の配向に関する研究は十分ではない．本研究では急縮小・急拡大流路を用いて，CNF 分散液 0.50 wt% の拡大流で誘起される繊維挙動について，偏光イメージングを利用した複屈折測定を実施した(1).

【結果と考察】

本研究では，流路中に設けたスリット部の幅（$2H_1$）を代表長さに設定し，平均流速 U を用いて代表せん断速度 $\dot{\gamma}_{typ} = U/H_1$ を定義した．実験ではこの代表せん断速度が $\dot{\gamma}_{typ} = 1.0 \times 10^2, 2.5 \times 10^2, 5.0 \times 10^2\ \mathrm{s}^{-1}$ となるように，流量をシリンジポンプで調整した．偏光イメージングの測定結果の例を Fig. 1 に示す．図中のカラーバーが複屈折の値と対応しており，青に近ければ CNF が無秩序な状態であることを示し，赤に近づくと内部の CNF が秩序的な構造となることを示している．流路の壁面では全体で高い複屈折を示している．これは，CNF が壁面によるせん断の影響で，構造を形成するためだと考えられる．一方流路中心線上では，位置によって複屈折が変化することが確認された．流路中心線上の複屈折について，各流量の定量評価を行ったものが Fig. 2 である．この結果から，偏光イメージングで確認された複屈折の変化は流量にかかわらず生じ，これは Sato らの高分子を用いた報告とも一致する(2)．また，この変化はほぼ同じ地点で生じることも示唆された．

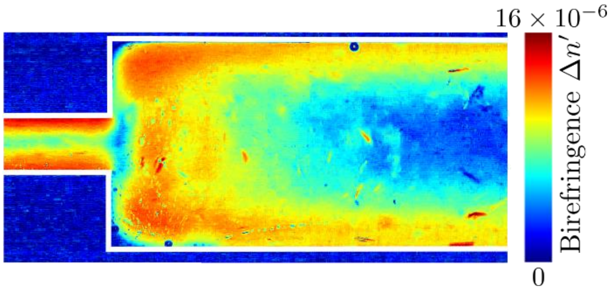


Fig. 1 The result of polarization imaging at expansion section in $\dot{\gamma}_{typ} = 5.0 \times 10^2\ \mathrm{s}^{-1}$.

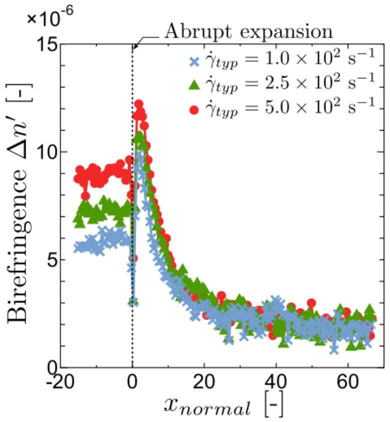


Fig. 2 Birefringence at expansion section in all typical shear rate $\dot{\gamma}_{typ}$.

【参考文献】

(1) Fuller, G. G. "Optical Rheometry of Complex Fluids", Oxford University Press (1995)

(2) Sato, T., Narumi, T., Yasuda, K., Ushida, A. and Kayaba, R., *Nihon Reoroji Gakkaishi (J. Soc. Rheol., Jpn)*, **44**, No. 2, pp. 109-116 (2016).

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

土壌中の根の引き抜き・倒伏に関するモデル実験

（東京大学大学院農学生命科学研究科）木下　茉優

【はじめに】

植物の根は，土壌中で地上部を支持するアンカーとして機能し，効果的に固定力を付与することができる．この固定力に対し，根の分岐構造が大きく寄与することが示唆されていた(1)が，どの要素がどの程度寄与しているのかについては必ずしも明らかではない．本研究では，根の分岐構造が地上部の支持や土壌の強靭化に与える影響について，定量的に解明することを目的とした．現象を詳細に解析するため，3D プリンタを用いて系統的にモデル構造を作製し，その場観察を行いながら強度を測定する実験を行うことで，制御されたモデル実験系による定量的理解を目指した．

【結果と考察】

まず，根の引き抜きに焦点を当て，八の字型に 4 分岐したモデル根を材料(樹脂・ゴム)，太さ等を変えて作製した．それらを図 1(a)のように，土壌に見立てたガラスビーズ中に埋め込み，引張試験機を用いて引き抜いて力を測定した．その結果，材料によらず，根の曲げ剛性と引き抜き力に強い相関を見出すことに成功した(図 2)．また，曲げ剛性の小さいやわらかい根と曲げ剛性の大きいかたい根の極限について，土壌と根との摩擦や土壌の破壊を考慮して現象を記述する理論モデルを構築した．理論による計算結果と実験結果とを比較したところ，図 2 のように良好な一致が見られた．

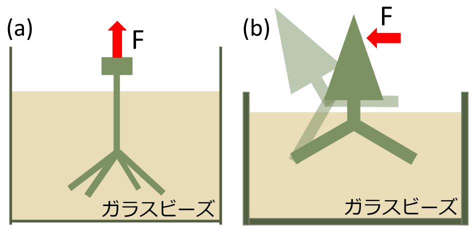


図 1 (a)引き抜き実験，(b)倒伏実験の模式

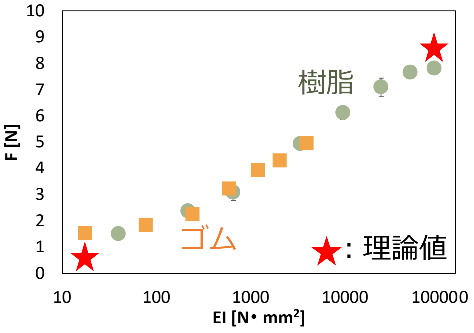


図 2 モデル根の曲げ剛性と引き抜き力

次に，倒伏特性に関する研究として，T/R 比を実際の樹木に近づけて約 3 に設定した 2 分岐八の字型のモデル根を，分岐角度を変えて作製した．それらを図 1(b)のように埋め込み，押し倒す際の力を測定した．その結果，分岐角度が 60 ~ 75 度で最大となる結果が得られた(図 3 実測値)．また，実験結果を説明するため，引き抜き実験の際に用いた理論を応用し，回転モーメントを考慮して倒伏挙動を記述する理論モデルを構築した．理論による計算結果と実験結果との比較を行ったところ，分岐角度の依存性を含め，定量的にも良い一致を示すことが明らかとなった(図 3)．これらの結果は，根系の力学特性に関するメカニズム解明に寄与するのみならず，理論モデルを用いた定量的予測が可能であることを示唆している．

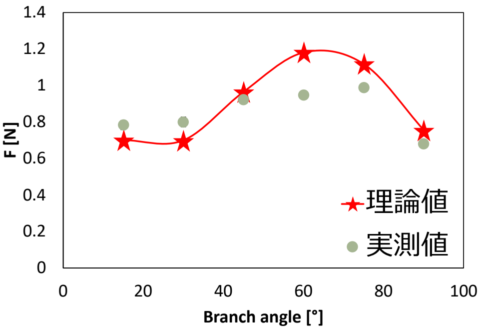


図 3 分岐角度と倒伏力

【参考文献】

(1) S. B. Mickovski et al., European Journal of soil science 58(6), 1471-1481.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

分子動力学による有機系単分子膜の分子配向解析

（兵庫県立大学大学院情報科学研究科）小林健洋，岡本隆一，鷲津仁志

【はじめに】潤滑材の中でも，有機系摩擦調整材や油性剤は金属表面に物理吸着や化学吸着し，自己組織化膜を形成することで，金属の直接接触を防ぎ摩擦を低減する [1]．この有機系単分子膜の潤滑特性を理解する上で「チェーンマッチング現象」という概念がある [2]．チェーンマッチングとは，油性剤分子と，直鎖の基油分子の炭素数が同じときに，金属基板上で自己組織化した有機分子吸着膜が強固となり，耐焼き付き性が向上するという現象である．我々は分子動力学法を用いた当現象の解析を目指していたが，初期吸着過程という現象の一端を捉えたにすぎなかった [3]．そこで本研究では，吸着膜が出来る直前の状況を念入りに設計し，分子の組み合わせが異なると静的および動的安定性がどう変化するかについて明らかにした．このシミュレーションにおいて，“強固な膜”が形成されたことが初めて分子シミュレーションによって確認できた．これは，潤滑技術のみならず，分子集合体の解析技術として非常に重要と考えられ，自己組織化の機構についてユニバーサルな原理を明らかにできると考えられる．

【結果と考察】Fig.1 は飽和脂肪酸であるステアリン酸（油性剤）とステアリン酸と等しい炭素数で直鎖状であるオクタデカン（基油）の系の熱平衡状態に達した後のスナップショットである．全体として分子が一方向へと配向しているように見受けられる．秩序性の高さを示す配向秩序パラメータの確率密度分布を解析したところ Fig.2 が得られた．横軸の値が 1 に近ければ秩序性が高いことを表すが，ステアリン酸とオクタデカンの系が最も秩序性が高いことがわかる．これは油性剤分子と基油がともにアルキル鎖が直鎖状の形状でその長さが一致していることで凝集力が高まり，緻密な配向となったと考えられる．これは膜の構造がチェーンマッチングの実験結果と相関することを示している．一方で，油性剤分子で間に二重結合をもつオレイン酸やエライジン酸ではこの秩序性は顕著ではなかった．これは二重結合があるため，基油分子と混合しても配向するときに長鎖部分に隙間が生じ凝集力が弱まったためと考えられる．

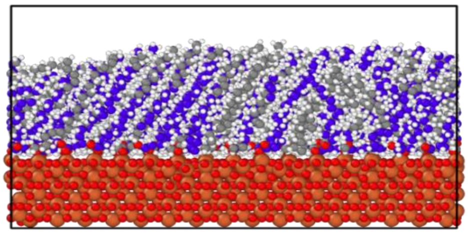


Fig.1 MD simulation side-viewing snapshot of the equilibrated structure of the stearic acid

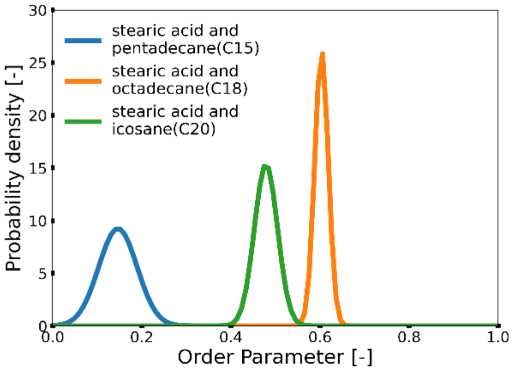


Fig.2 Probability distributions of order parameter in the stearic acid and octadecane system

【参考文献】

[1] F. Bowden and D. Tabor: The friction and lubrication of solids, Oxford, Clarendon Press, Oxford (1964).

[2] T. C. Askwith, A. Cameron & R. F. Crouch: Proc. Roy. Soc. Lond. A, 291 (1966) 500.

[3] M. Konishi, H. Washizu, Trib. Intl., 149, 105568 (2020).

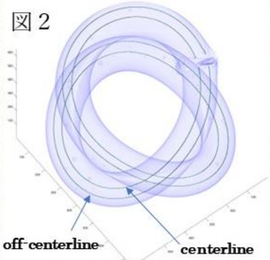
Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

三葉結びにおけるねじれ変形の力学

（慶應義塾大学理工学部機械工学科）後藤大輝、佐野友彦

【はじめに】結び目は高分子や DNA、靴紐、船舶業から外科手術に至る様々な長さスケールでその力学特性が活用されている。結び目理論は数学の一大分野であるが、実在する結び目の力学特性との関係は未だ非自明であり、近年研究が盛んに行われている。特に実用上重要である、きつく結ばれた結び目の形状を予測するためには棒の自己接触や摩擦、曲げねじり特性などを１つ１つ紐解いていく必要がある。本研究では、最も単純かつ非自明なトポロジーを有する閉じた結び目である、三葉結び(trefoil knot)を取り上げる(図 1)。Johanns ら(1)によって、結び目理論における理想的な三葉結びと実在の三葉結びの間の類似点と相違点が明らかになった。本研究では三葉結びにねじれを加えた際の形態変化を実験的に考察した(図 1)。

【結果と考察】三葉結びの非自明なトポロジーを実験的に定量化するために、その 3 次元的な幾何構造を X 線断層撮影(μCT)によって可視化した。μCT によって棒の曲げとねじりを可視化するために、Johanns らの研究(1)にならい複合材料状の弾性棒を作成した。棒の中心線(centerline)に密度の異なるシリコーンゴムをファイバー状に流入させ、ねじれを可視化するために中心線に並行にもう 1 本の密度の異なるファイバー(off-centerline)を作成した。図 2 でこの 2 本のファイバーの位置を可視化した。2 本のファイバーの曲率や互いの位置関係を測定することで、三葉結びの曲率やねじれ率を調べることができる。三葉結びにおけるねじれの役割を明らかにするために、結び目の一端に回転ステージでねじれを加え、結び目の形態変化を考察した。回転ステージを 1、2 周させた際は(ねじり角度 2π,4π)、三葉結びは、結び目全体が中心線に沿って収縮することで、ねじる前の形状に似た状態をとる。しかしねじり角度をさらに増加させると、棒同士の接触状態を変えて大きく面外変形をした方がエネルギー的に得になるため、まがりねじれる大変形が生じることがわかった(図 3)。実在の三葉結びの変形は、材料の曲げやねじり特性と大きく関係していることがわかった。



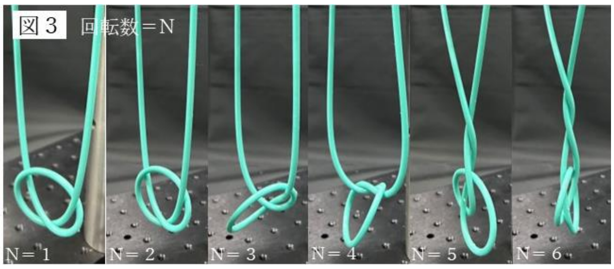


図 1. 直径 8mm の三葉結びの実物写真。(今後矢印方向にねじれを付与)図 2. 内部の 2 本のファイバーを可視化した画像。図 3. ねじれによる形態変化を観察した実験写真。

【参考文献】

(1) P. Johanns, P. Grandgeorge, C. Baek, T. G. Sano, J. H. Maddocks, and P. M.Reis, “The shapes of physical trefoil knots,” Extreme Mechanics Letters, vol. 43,2 2021.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

水／水相分離ミクロ液滴に局在する微小管・キネシンの自発的対流生成

([1] 東大総合文化、[2] 同志社大生命医科、[3] 遺伝研、[4] 東京理大先進工、[5] 三重大工、[6] NICT 未来 ICT 研、[7] 兵庫県立大理、[8] 京大高等研)　作田　浩輝 [1]、中谷　真規 [2]、鳥澤　嵩征 [3]、住野　豊 [4]、湊元　幹太 [5]、大岩　和弘 [6,7]、吉川　研一 [2,8]

【はじめに】

複数の高分子の混雑溶液では、高分子が各相に分かれる相分離現象が生じることが知られている。このような相分離は溶液条件によって数〜100 μmの内外の高分子組成を異にするミクロ液滴が長時間(数時間〜数日)にわたって安定して存在する。相分離ミクロ液滴にDNAや細胞骨格を形成するタンパク質であるアクチンが液滴の内部に自発的に局在することを明らかにしてきた[1]。本発表では、生体内の運動を形成する骨格・モータータンパク質である微小管・キネシンが液滴内部に局在し自発的に生じる対流について報告する。

【結果と考察】

高分子のデキストラン(DEX)とポリエチレングリコール(PEG)を DEX の分率が小さくなるように混合した場合に、PEG-rich 溶液中に DEX-rich ミクロ液滴が形成する。このような液滴の形成条件に微小管、および、キネシンを混合すると自発的に液滴の内部に局在することを見出した[2]。特に微小管は液滴の界面部分に多くが集まり Cortex 構造を形成する(図 1(a))。キネシンは KIF5B$_{\mathrm{head}}$-Eg5$_{\mathrm{tail}}$ の 4 量体であり、微小管の架橋構造を形成する。微小管上でのキネシンの滑り運動を誘起するアデノシン三リン酸等を混合すると微小管とキネシンの複合体は液滴の内部で対流を形成した(図 1(b))。また、対流にともない液滴が重心運動することも見出した。本研究で用いた微小管・キネシンはバルク溶液中では、キネシンが一箇所に集合し微小管が放射状に伸びる Aster 状構造を形成し、それらが収縮的なネットワークを形成する[3]。

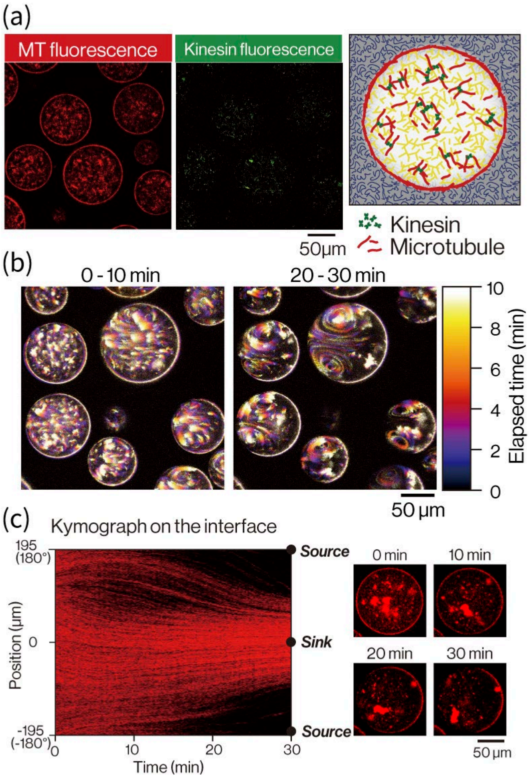


図1 相分離ミクロ液滴に局在して対流を形成する微小管・キネシン[2]

対流の生成時には、液滴の界面に局在した微小管・キネシンが一箇所に収縮していくこと(図 1(c))が確認でき、このような対称性の破れが対流生成に寄与していることを数理モデルによるシミュレーションを通して明らかにした。

【参考文献】

[1] N. Nakatani, *et al., ChemBioChem* **19**, 1370 (2018).

[2] H. Sakuta, *et al.*, *Commun. Chem.* **6**, 80 (2023).

[3] T. Torisawa, *et al., Biophys J.* **111**, 373 (2016).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

高分子鎖における First Passage 問題

（青山学院大学大学院理工学）阪本悠太、坂上貴洋

【はじめに】

First Passage 問題とは、空間上に用意された目標物への到達を議論する確率過程の問題である（図１）。生体内の物質輸送や化学反応などの現象は、First Passage 問題の理論から理解されることが期待されており、タンパク質などの生体物質の多くが高分子であることを考えると、高分子鎖における First Passage 問題は重要なテーマである。

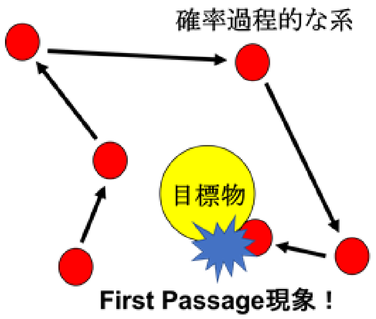


図１　First Passage 現象

高分子鎖は、複数のブラウン粒子がバネで繋がったバネビーズモデルとしてモデル化される。ここで、高分子鎖中の一つの粒子（タグ付きモノマー）に着目すると、隣接したブラウン粒子の運動がバネを通して複雑に影響し、通常のブラウン運動とは異なる運動を見せる。First Passage 問題の理論においても、理論の充実している通常のブラウン運動とは異なり、高分子鎖の理論解は、その複雑な運動に起因して、導出に至っていない[1]。そこで、本研究では、最も単純な高分子モデルである Rouse モデルを採用し、その良好な解析的性質を利用して、新たに First Passage 問題の理論解を提案する。

【方法】

本研究では、First Passage 問題の中でも、目標物までの到達時間である First Passage Time(FPT)を議論する。Rouse モデルの解析的な性質として、タグ付きモノマーの運動を複数の互いに独立な基準座標の線形結合として扱うことができる。また、それぞれの基準座標は単純な確率過程の問題であるため、それぞれの基準座標を単独で扱うのであれば、FPT の理論解は存在する。よって、本研究では、「既知の情報である各基準座標の First Passage 問題の理論を応用して、その線形結合である Rouse モデルの First Passage 問題を解析する」という方針をとる。

【結果と考察】

理論解の導出は発表時に説明するが、各基準座標の FPT 理論を組み合わせ、Rouse モデルの理論解を得ることができた。まずは、Rouse モデルの中でも、モノマー数が２つだけの最も単純なモデルである Dimer モデルでその整合性を確認する。右図は、本研究による提案解と数値シミュレーションによる結果を比較したものであり、二つの値がよく一致していることが確認できる。

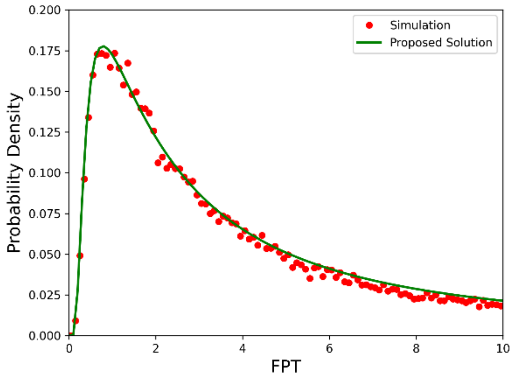


図２　シミュレーション結果と提案解

【参考文献】

[1] Y. Kantor and M. Kardar, Phys. Rev. E 76, 061121(2007).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

高分子官能基に影響を受け閉じ込められた水分子の水素結合状態に関する分子動力学解析

阪大院基礎工　四方志，菊辻卓真，八十島亘宏，金鋼，松林伸幸

【はじめに】

poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA) は血液適合性材料であり、人工血管等に用いられている。PMEA 表面と緩く相互作用した水分子の存在が血液との接触時にタンパク質の吸着と変性を抑制し、非血栓性において重要な役割を果たすとされる。示差走査熱量計(DSC)を用いた実験では、3 種類の水が確認された。自由水、中間水、不凍水と定義され、特に-40℃で凍結する中間水はPMEA で特異に観測された。したがって、PMEA 近傍の水分子の動態は血液適合性にとって重要であり、特定の水分子の特性を解明する研究が注目されている [1]。本研究では、水分子の動的性質を説明するために分子動力学（MD）計算を行った。アクセプター酸素に着目した水素結合状態の解析と整理を行った [2]。

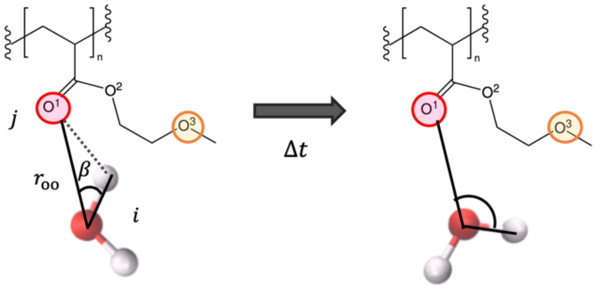


図 1 ： 水素結合状態変化の一例 （左） $t = 0$ における水素結合状態 （右） $t = t$ で β の増大により破断した状態

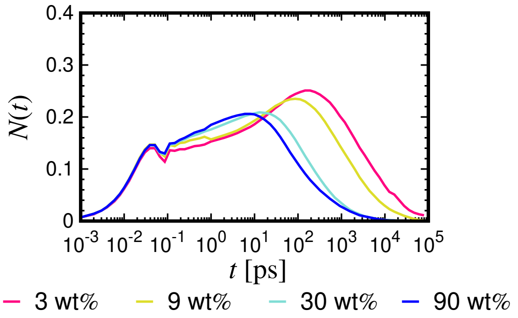


図 2：PMEA の O3 における時間相関関数 $N(t)$。

【結果と考察】

高分子には PMEA の他に類似構造を持つ PHEMA, PMC1A を用いた。重合度 50 の高分子 20 本に対して含水率が 3～90 wt%となる系を作成し、MD 計算を行った。水の酸素原子とアクセプターとなる酸素原子(水および高分子の官能基)間の距離 r_{OO} と OH – O 角 βを用いて水素結合を($r_{\mathrm{OO}} < 0.35$ nm, $\beta < 30°$)によって定義した(図 1)。 時刻 $t = 0$ の水素結合状態から $t = t$ において水素結合長を維持しつつ、水素結合角 $\beta > 30°$ となり水素結合が破断された割合を示す時間相関関数 $N(t)$ を計算した。カルボニル酸素 O^1, メトキシ酸素 O^3, 他の水分子の酸素 O^w との水素結合についてそれぞれ解析を行い、水素結合が破断してから拡散に至るまでの中間状態を評価した。

図 2 で示した PMEA の O^3 における $N(t)$ で特徴的な結果が得られた。水素結合の短時間での破断が起こりやすく~10 ps 程度の時間では拡散することなくアクセプター近傍に存在していることが判明した。これは他のアクセプター酸素との水素結合では見られなかった。水分子の並進運動に強い制限がされているが、回転の束縛する相互作用が弱くなっていると考えられる。PMEA に特異に観測された水素結合の性質は、実験から描像されていた緩い相互作用が働いていることを示唆するものである。

【参考文献】

(1) M. Tanaka, *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 92, 2043 (2019).

(2) K. Shikata, *et al.*, *J. Chem. Phys.* 158, 174901 (2023).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

レーザ励起液滴における自励運動とその相互作用

(1慶大理工, 2納谷ラボ) 佐藤　守[1], 納谷昌之[1,2], 白田真也[1], 斎木敏治[1]

【はじめに】

近年、「非平衡」な系において局所的にエネルギーを変換しながら動く(自己駆動する)物質や物体、すなわちアクティブマターに関する研究が進展してきた。これは、「非平衡」が自然界の集団運動における本質であるからである。熱力学第二法則にしたがうとすれば、あらゆる構成物は時間経過とともに散ってゆくはずであるが、代謝があることで特定の形状が自己組織的に構成され、その要素を入れ替えながら全体としての形状が保持される。そのスケールは様々であるが、非平衡状態において自己駆動するアクティブマターについて、物理的なモデルを通して性質や原理を研究することは集団全体に存在する普遍性や行動原理を理解することに繋がると考えられており、集団全体のマクロな普遍性と個が持つミクロな普遍性を結び付けることで生命システムにおけるダイナミクスの理解や、生物的な機能を有するロボットシステムデザインへの応用が期待されている。

我々はこれまで、エタノールと PEG の混合液にレーザを照射すると形成される液滴に焦点を当てた研究をしてきた。その中で液滴が自発的に回転運動を始めることが実験的にわかっている(1)。また回転運動とレーザパワーとの関係性についても報告をしてきた。(2)

本研究では、更に二体の液滴を形成し、液滴間の相互作用について報告を行う。

【結果と考察】

異なる運動をしている液滴を近づけていくと液滴同士の運動方向が揃い、ばねの単振動のように振舞う様子が見られた。また更に近づけていくと、液滴が一つの液滴として運動することが分かった。これは液滴内に働く濃度マランゴニ流や、液滴間に働く表面張力が競合した結果であると考えられる。

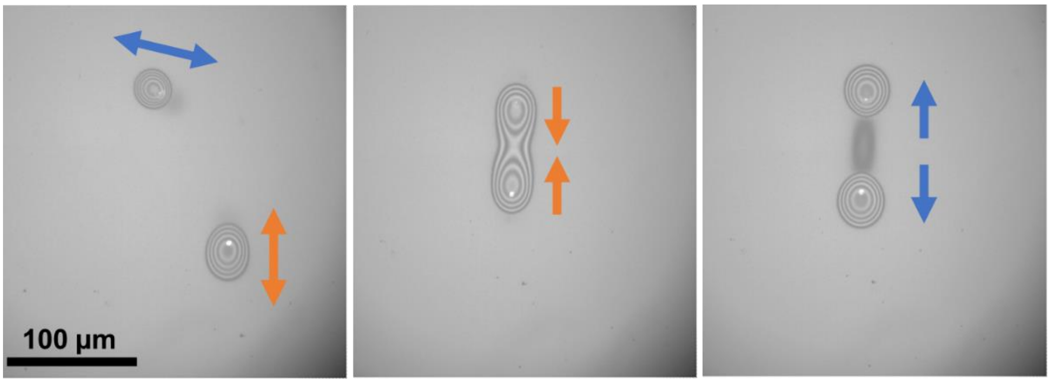


図 ： 二体液滴の相互作用

【参考文献】

(1)納谷昌行, 大原七海, 斎木敏治, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会(2022) 23a-D315-6
(2)佐藤守, 納谷昌之, 白田真也, 斎木敏治, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会(2023) 20a-A601-6

【謝辞】本研究は JSPS 科研費 23H04810 の助成を受けたものです。

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

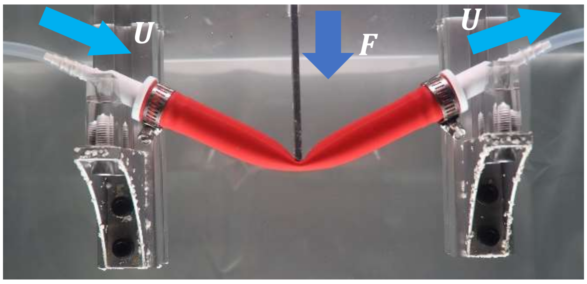
しなやかな流路の力学と幾何学

（慶應義塾大学）澁谷幸樹、佐野友彦

【はじめに】円筒形状のシェルは構造デザインだけでなく、柔らかな材料における機能性付与の目的や血管、バクテリアなどの生物の構造[1]でも使われている。しかしその挙動をモデリングして予測するには材料の弾性、試料の幾何形状、実験系の流体構造連成の複雑な相互作用を紐解く必要がある。本研究では内部に流体を流した状態の円筒シェルの剛性と不安定性を調べる。この現象はシャワーやホースなどで日常的にみられるだけでなく、欠陥の力学特性のモデル化にも有用である。流体の影響を調べるため、内部に流れる流体の様々な速さに対して三点曲げ試験を行い、曲げに必要となる力を計測した。本研究を通して曲げに必要な力と内部の流体の流速に相関があることを明らかにした。

【結果と考察】本研究では曲げに伴い円筒表面にキンクが発生する現象（Brazier 効果[2]と呼ばれる）とそれが生じる最大荷重に注目した。これは弾性チューブの剛性や構造不安定性を計算するための基本的なモデルとなると考えており、さらには血管の剛性などを計算する手法の一つとして医療分野にも適用できると考えている。

1)



2)

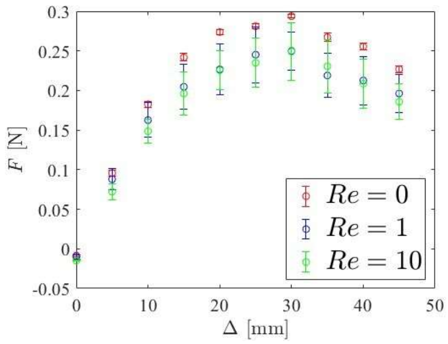


図　実験の様子と実験結果のグラフ

1) 測定時の三点曲げ試験の様子。試験は重力の影響を減らすため水槽内で行い、試料の中心を板型のインデンターで押し込みその時の力を測定した。

2) インデンターを$\Delta[mm]$押し込んだ時の力$F[N]$の関係をチューブ内に流れる流体のレイノルズ数 $Re = \rho U d/\mu$ (ρ: 流体の密度, U: 流速, d: 円筒シェルの内径, μ: 流体の動粘性)を変化させて測定しプロットしたもの。

【参考文献】

(1) Qiu, L., Hutchinson, J. W., & Amir, A. (2022). Bending Instability of Rod-Shaped Bacteria. *Physical Review Letters, 128*(5), 058101.

(2) Brazier, L. G. (1927). On the flexure of thin cylindrical shells and other “thin” sections. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 116*(773), 104-114.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

多分散粒子の圧縮

（東京大学総合文化研究科）嶋本 大祐　柳澤 実穂

【はじめに】

大小様々の粒子からなる多成分系である多分散粒子は、細胞内分子から惑星表面を覆う岩石まで幅広いスケールで現れる。こうした系は応用上重要なだけでなく、高い密度で充填可能であることや特徴的長さスケールが曖昧であることなど興味深い性質を持っていることがわかってきた。しかしながら、変形に対する応答やダイナミクスについての理解は未だ進んでいない。本研究では、多分散粒子の圧縮の結果生じる現象を数値計算と実験によって調べた。

【結果と考察】

調和ポテンシャルによる純粋な斥力で相互作用する円形の多分散粒子に対し、ゆるやかな圧縮と開放からなる力学的アニーリングを施す数値計算を行った。大きさがおよそ均一な粒子からなる系では、力学的アニーリングによってジャミング転移点が上昇する、すなわちより高密度の充填になることが知られている [1,2]。

一方、粒径rがべき分布（$N(r) \propto r^{-2.3}$）にしたがう多分散粒子について数値計算を行ったところ、圧縮率が小さい条件では二分散の場合と同様にジャミング転移点が上昇したが、さらに大きな圧縮率でアニーリングするとジャミング転移点は大きく（5%程度）低下する、すなわち一度圧縮すると膨張するという性質を持つことがわかった。このような現象の原因について、圧縮下で粒径によって偏析することで各粒子をとりまく粒子が自身と近い大きさのものばかりになり、力学的アニーリングの前より空隙が増加したことによるものであることを示唆する結果が得られた。

また、ここまで述べたような圧縮による偏析は、すくなくとも相互に侵入できない粒子からなる二次元系においてはおこらないものであると予想される。そこで、それを検証することと多分散系特有のダイナミクスを明らかにすることを目的として実験を行っている（図1）。本発表では、弾性的な液滴、塑性変形する粒子など、擬2次元的な柔らかい粒子を圧縮することで起こる現象の実験結果についても議論したい。

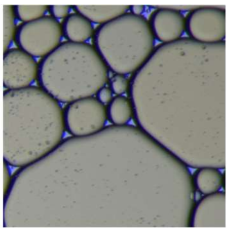
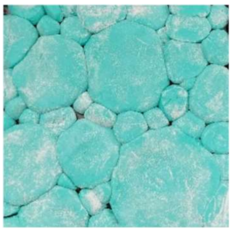
(a)  (b) 

図１　圧縮された (a)弾性的な粒子と(b)塑性的な粒子。

【参考文献】

(1) N. Kumar and S. Luding, *Granul. Matter* (2016).

(2) H. Matsuyama, et al. *Eur. Phys. J.* (2021).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

木材-ゴム柔軟複合材料の力学特性に与えるフィラー構造の影響

（東大院農）下形　晃平，山口　哲生

【はじめに】

近年の環境保全への要求の高まりにより，植物由来の原料を用いた木質複合材料が注目を集めている[1]．本研究では，セルロースナノファイバー（CNF）のようなナノフィラーではなく，マクロな木材の薄片をそのままフィラーとして活用し，多孔質の木材にシリコーンゴムを充填することで，柔軟かつ強靭な複合材料の創製を目指した．

【結果と考察】

本研究では，空隙率の高いバルサ材を用い，樹木の軸方向に 70 μmの厚みで薄くスライスした木片をフィラーとして用いた．アセチル化処理によりシリコーンゴムの浸透性を改善した後，シリコーンゴムを含侵・硬化させて木質複合材料を作製した．

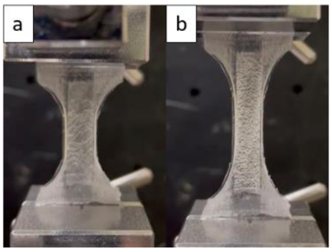


図 1．樹木の軸方向に薄くスライスした木片を用いた複合材料試験片における，(a)ひずみ初期，および(b)破壊直前のスナップショット．

図 1 に引張試験のスナップショットを示した．また，図 2 には，ゴムのみの試料の応力―ひずみ曲線との比較を行った．薄片を 1 枚入れた試験片は，最大応力，最大ひずみの両方がゴムのみの試験片よりも明確に向上した．この結果は，各木質細胞の内腔にゴムが満たされ，強固なアンカリングを形成することで，細胞のマイルドな剥離が誘導されエネルギーの散逸を促しつつマトリクスの破壊を回避したことによると考えられる．以上から，アンカリングの制御により，硬くて脆い材料を先に犠牲的に破壊することで全体としての強靭性を増すという，ダブルネットワークゲルに近い強靭化メカニズムが明らかになった．また，マトリクス中にフィラーを分散させずに複合材料の強靭化を実現するという，新しい手法が示唆された．

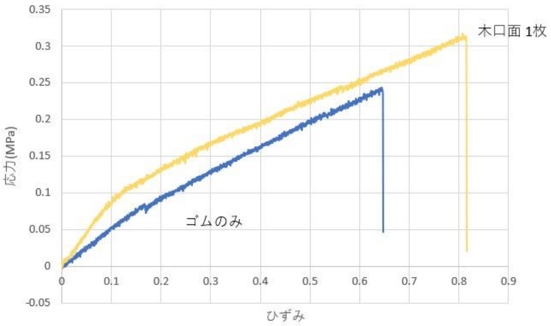


図 2．ゴムのみの試験片，木口面の薄片を 1 枚入れた試験片の応力-ひずみ曲線

本複合材料のさらなる物性向上のために挙げられる手段として，フィラー構造の改善が考えられる．足掛かりとして，日本の伝統的な屋根の工法として知られる「こけら葺き」に着想を得ることで[2]，フィラーにかかる応力を分散し，大変形や繰り返し荷重にも耐えつつ，力学特性を向上できるフィラー構造を，3D プリンタを用いたモデル化や数値計算を用いて検討している．当日は，それらの結果についても報告を行う予定である．

【参考文献】

[1] N. Saba, F. Mohammad, M. Pervaiz, M. Jawaid, O. Y. Alothman, M. Sain, *Int. J. Biological Macromol.* **97**, 190 (2017).
[2] S. W. Hwang, H. Isoda, T. Nakagawa *et al., J. Wood Sci.* **67**, 14 (2021).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

タウタンパク質への塩添加の影響

東京都立大学ソフトマター研究室　高橋知未、 栗田玲
東京大学機能病態学教室　山根大典、巽理紗、堀由起子、富田泰輔

【はじめに】

認知症は、近年の高齢化とともに患者数が増加しており、2060 年には患者数が約 850～1150 万人まで増加すると予測されている[1]。その中でも患者の半数以上を占めているアルツハイマー型認知症(AD)は、タンパク質の異常凝集によって、細胞死が引き起こされることで発症する。AD の根本的な治療や予防のため、タンパク質が細胞内で凝集する機構を明らかにする必要がある。本研究では、原因物質の一つであるタウタンパク質の異常凝集について、時間発展ダイナミクスや塩添加の影響から調べることを目的とした。

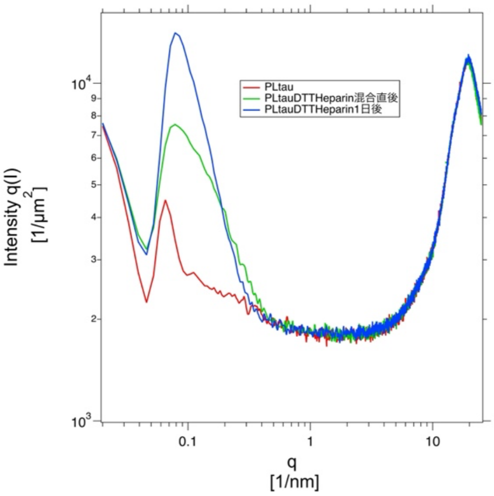
【結果と考察】

タウタンパク質の分散媒へパリンを添加し、振盪すると線維化することが知られている(2)。タウタンパク質の分散媒にヘパリンを添加した直後に X 線小角散乱　SAXS を撮ったところ、小角にタウの分散状態や相分離時とは異なる散乱が見られた。顕微鏡観察では、直後に線維化を確認することはできなかった。

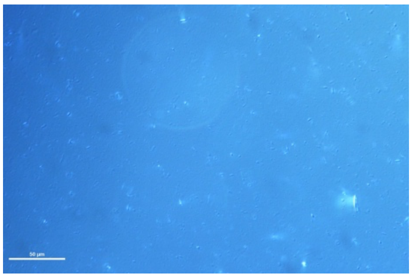
一方、ヘパリンの添加後に 24 時間振盪したところ、顕微鏡では線維化が確認され、小角に大きな散乱が見られた。

また、塩の添加により小角の散乱が小さくなり、線維化を抑制するような結果が得られ、塩の濃度によって、散乱強度が緩やかに減少することがわかった。

本発表では、ヘパリンの添加直後に形成される状態と振盪の効果についての考察について発表する。



a　ヘパリン添加直後と 24 時間経過後の SAXS の散乱(赤:分散状態、青：24 時間経過後、緑：混合直後)



b 顕微鏡により観察された線維化の様子

【参考文献】

(1) 二宮利治,日本における認知症の高齢者人口の将来推計に関する研究, 厚生労働科学研究費補助金厚生労働科学特別研究事業(2015).
(2) H.L. Zhu ,et al. *J Biol Chem* **285**, 3592-3599 (2010)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

編み物のカール形状が生じるメカニズム

(慶應義塾大学理工学部機械工学科) 田尻　琴音、佐野　友彦

【はじめに】 編み物の最も基本的な編み方である平編み構造では、セーターの袖口が丸まるという現象に見られるように、編み物の縁で３次元的なカール形状が自然に発生する。平編みとは、横方向(ウェール方向)と縦方向(コース方向)で同じループ構造が連なった編み方のことである。編み物のカール挙動については、ループを形成する際に編み糸が受ける曲げ・ねじりによる残留応力に起因していると考えられている(1)。しかし、編み物の力学特性は２次元的なモデル化に基づくものが多いため(2)、３次元的な幾何学と力学との関係性はこれまで明らかにされてこなかった。そこで、本研究では編み機を使用して平編み構造に生じる 3 次元的なカール形状を系統的に作成し、そのメカニズムについて考察した。１ループあたりの幾何学的な形状から、ループ単位での力学とカール挙動の相関について議論した。さらに、その３次元的な形状を弾性棒のシミュレーションを用いて調べた。

【結果と考察】 編み機を用いて、ウェール方向およびコース方向の編み数(それぞれ N_w, N_c)が異なる平編み構造を作成し、その３次元的な構造を分類した。N_c 及びアスペクト比 N_w/N_c を変化させる事で、ウェール方向/コース方向に沿ってのみ巻かれたサイドカール/トップボトムカール形状、さらに両者の巻き方が共に現れる２重カール形状の３つの巻き方が現れることが明らかになった(図 1)。このパラメータ依存性は、N_c と N_w/N_c の変化によりループ形状が変化することと関係すると推察される。そこでループ形状の 3 次元的な変形を詳しく調べるために、編み糸を弾性棒としてモデル化し、ループの半形状(図 2(a))の力学平衡状態を調べた。ループ形状のウェールとコース方向の長さに応じて、ループ形状は平面的な状態から面外変形しねじれた状態へ転移することが明らかになった(図 2(b))。以上の結果から編み物のカール形状が生じる背後には、ループ形状の力学特性が関係することが推測される。

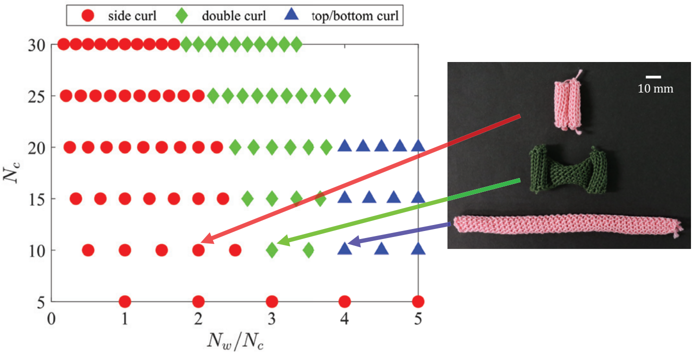


図 1 カール形状の転移

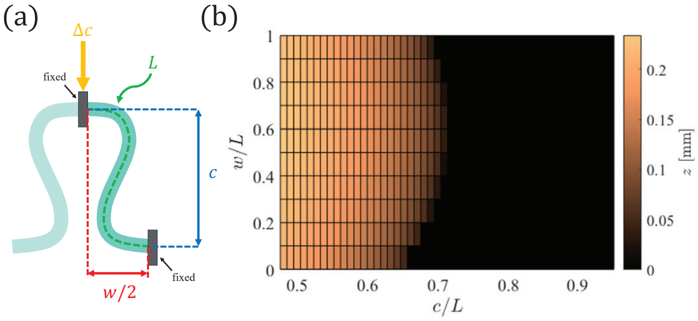


図 2 (a)弾性棒モデル (b)面外変形高さの形状依存性

【参考文献】

(1) M. Shohreh, A. Saeed, and H. Hasani, “Investigation into the Curling Intensity of Polyester/Cotton Single Jersey Weft Knitted Fabric Using Finite Element Method,” *Journal of Textiles and Polymers*, vol. 3, pp. 86–90, June 2015.

(2) S. Poincloux, M. Adda-Bedia, and F. Lechenault, “Geometry and elasticity of a knitted fabric,” *Physical Review X*, vol. 8, June 2018.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Impact of void morphology on compressive yield stress of sticky spheres

Michio Tateno, Yinqiao Wang and Hajime Tanaka
Research Center for Advanced Science and Technology, University of Tokyo

[Introduction]

Gels and attractive glasses, both non-equilibrium and non-ergodic states formed by sticky particles, appear in various soft matter systems, including colloids, emulsions, proteins, and wet granular materials. Previous research [1,2] has uncovered intriguing similarities and differences in their structural, dynamic, vibrational, and mechanical properties. Nevertheless, the transition between gels and attractive glasses with increasing volume fraction (Figure 1) and the clear distinction between the two remain ambiguous.

[Results and Discussion]

Here, we address this issue by examining the continuous volume fraction variation during the uniaxial compression-induced gel collapse. Combining confocal microscopy observations with Brownian dynamics simulations, we identify a two-step structural transition in gels: from gels with space-spanning percolating voids to those with closed isolated voids, ultimately leading to attractive glasses without any voids. Notably, these first and second structural transitions exhibit a strong correlation with a rapid increase in normal stress and normal stress difference, particularly evident at lower temperatures. This finding offers novel insights into the categorization and understanding of disordered non-equilibrium, non-ergodic materials from a mechanical standpoint.

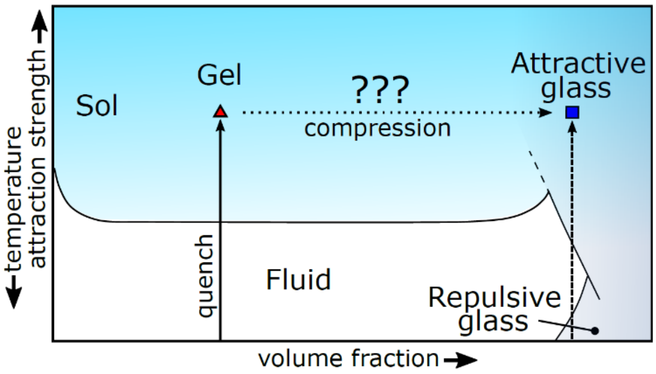


Figure 1. The typical phase diagram for sticky spheres. The vertical solid and dashed arrows represent two pathways to reach arrested states (gels and attractive glasses) through temperature quench. In this study, we examine how gel states transition towards attractive glass states as the volume fraction increases due to compression (as indicated by the dotted line).

[References]

[1] E. Zaccarelli, J. Phys.: Condens. Matter 19, 323101 (2007).
[2] C. P. Royall, et al., J. Phys.: Condens. Matter 33, 453002 (2021).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

非相反 Swift-Hohenberg 方程式における相分離ダイナミクスの数値解析

[1] 千葉大学融合理工学府，[2] 千葉大学大学院理学研究院，[3] 国科温州研究院
楯山 裕太 [1]，伊藤 弘明 [2]，好村 滋行 [3]，北畑 裕之 [2]

【はじめに】

近年, 非相反性の概念は, アクティブマターや非平衡統計力学の分野で注目されている[1]。相分離ダイナミクスを記述する連続体モデルとして，秩序変数と自由エネルギー汎関数を用いた勾配系方程式が広く用いられていたが，近年ではその発展として，勾配系ダイナミクスを多成分かつ非相反に拡張した擬勾配系ダイナミクスが盛んに研究されている[2]。

本研究では，非保存型のモデルの 1 つである Swift-Hohenberg 方程式を非相反に拡張した擬勾配系ダイナミクスを考える。Swift-Hohenberg 方程式は不安定化の特徴波数を持つ。先行研究では，非相反 Swift-Hohenberg 方程式についてのいくつかの特徴的な時空間パターンが報告されている[1, 3]。非相反性を導入することにより，相反な場合には現れることのない時空間的な振動パターンが現れることが特徴である。本研究では，2 変数非相反 Swift-Hohenberg 方程式系においてこれらの特徴的な時空間パターンが現れるメカニズムを明らかにすることを目的とする。

【結果と考察】

本研究で用いる 2 変数非相反 Swift-Hohenberg 方程式：

$$\partial_t \phi = -\left(q_\phi^2 + \partial_x^2\right)^2 \phi + \varepsilon\phi - \phi^3 - (\chi + \alpha)\psi,$$

$$\partial_t \psi = -\left(q_\psi^2 + \partial_x^2\right)^2 \psi + \varepsilon\psi - \psi^3 - (\chi - \alpha)\phi$$

には，不安定化を特徴づけるパラメータε，相反・非相反相互作用のパラメータχ, α，それぞれの成分の特徴波数q_ϕ, q_ψといったパラメータがある[1, 3]。今回，特徴波数q_ϕ, q_ψは 2 成分で共通とし，不安定化を特徴づけるパラメータεと相反・非相反相互作用のパラメータχ, αの 3 つを変化させた。非相反相互作用αが大きな領域では，空間的に一様に振動したパターンが時間的に振幅を変えずに一方向に伝播するパターン（chiral 相）が広く見られるが，非相反相互作用αの大きさが相反相互作用χと同程度になると，空間的には静止し，時間的に振動を繰り返すパターン（swap 相），またそれらが混在するパターン（chiral+swap 相），時間的に振動しない空間パターン（aligned 相）が現れる（図 1）。発表では，これらの特徴的なパターンの相図をもとに，それらの間の分岐構造を議論する。

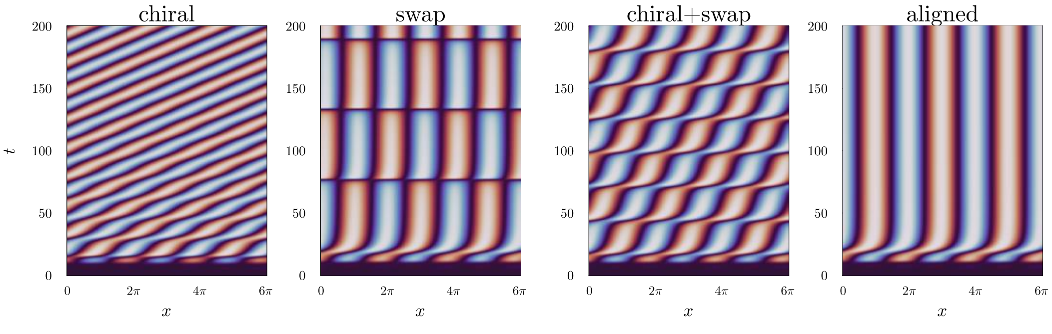


図 1. ϕの時空間プロット。赤・青はそれぞれ正・負の値を表す。

【参考文献】

(1) M. Fruchart, R. Hanai, P. B. Littlewood, V. Vitelli, *Nature* **592**, 363–369 (2021).

(2) S. Saha, J. Agudo-Canalejo, R. Golestanian, *Phys. Rev. X* **10**, 041009 (2020).

(3) D. Schüler, S. Alonso, A. Torcini, M. Bär, *CHAOS* **24**, 043142 (2014).

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Dynamics of Crack Propagation in Drying Sessile Droplets Containing Protein and Glucose

(Univ. Tokyo) Shingo Tabuchi, Anusuya Pal, Gen Honda, Miho Yanagisawa

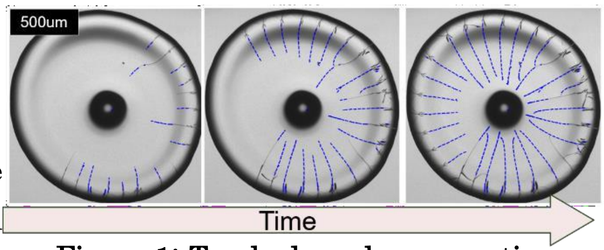


Figure 1: Tracked crack propagation.

[Introduction]

Drying patterns of colloidal droplets, such as the "coffee-ring" patterns, are explained by the pinning of droplets and the colloidal transport by Marangoni and capillary flow (1). However, the underlying dynamics, such as the crack propagation, growth rate, the location where the cracks form, and the origin of crack-forming forces, are still unclear, especially in the bio-relevant drying droplet systems. Previous studies have mainly analyzed the crack patterns at the dried states (2). However, this does not allow us to elucidate the mechanism of different types of cracks. In this study, we study the drying sessile droplets containing protein and glucose, focusing on crack dynamics and analyzing the correlation between crack growth and local viscoelasticity.

[Results and Discussion]

The droplet consists of a two-component aqueous solution consisting of lysozyme at a fixed concentration and different glucose concentrations. Image analysis tracks the propagation of cracks in the droplet as it dries (Figure 1). We find that the crack growth speed is slower in droplets when more glucose is added. When we measured the kinematic viscosity of the aqueous solution before drying, we found a positive correlation between the amount of glucose and the viscosity. Furthermore, measurements of the viscoelasticity of the droplet taken while drying using atomic force microscopy (AFM) confirmed that the droplet changed from liquid to solid before cracking occurred. These results suggest that the initial solution viscosity before cracking is significantly involved in the crack dynamics. We also find that the crack propagation rate is not constant, starting slowly from the edge of the droplet and growing faster as it reaches the central regions. This could be related to the bump-like height profile at the droplet edge. In the future, we plan to find the local viscoelasticity and the protein distribution within the droplet, which changes during the drying process, and investigate the mechanism of crack formation by finding the correlation between them.

[References]

(1) Deegan, R. et al. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops. Nature 389, 827–829 (1997).

(2) Pal, Anusuya, et al. A comparative study of the drying evolution and dried morphology of two globular proteins in de-ionized water solutions. RSC advances 10.29, 16906-16916, (2020).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Effects of Deformability on the motility-induced phase separation (MIPS) in an active deformable cells model

Duc Dam T.[1], Kiwamu Yoshii[1], Nen Saito[2],
Takeshi Kawasaki[1], Kunimasa Miyazaki[1]
(Department of Physics, Nagoya University[1];
Graduate School of Integrated Sciences for Life, Hiroshima University[2])

[Introduction]

In recent decades, physicists have increasingly focused on a diverse class of many-body systems where components extract energy from their environment to drive irreversible dynamics. These systems, collectively termed "active matter", exhibit unique phenomena relevant to various biological occurrences, such as bird flocks, fish schools, and migrating cell populations. Examples include the anomalous enhancement of large-scale density fluctuations known as giant number fluctuations (GNF), active jamming, and motility-induced phase separation (MIPS), which is the central theme of our current work. MIPS typically occurs when a dense phase and a dilute active gas phase coexists, particularly when the particles' speed decreases sharply in regions of high local density [1]. Yet, the studies of these phase-separated active systems are usually limited to cases of molecules or particles with fixed shapes. Conversely, deformable active particles are prevalent in many physical systems such as cell populations, developing tissues, bacteria, etc. In the current study, we aim to explore the fate of motility-induced phase separations in a model of active deformable particles.

[Results and Discussion]

In this study, we employ a model of self-driven deformable cells recently proposed by Saito and Ishihara [2]. Their study reveals that at high-density conditions close to unity, altering the motility and deformability of the cells leads to the emergence of three distinct phases: a crystalline rigid phase, a fluid phase characterized by nearly circular particles, and a soft-fluid phase where particles exhibit significant deformation. Here, we focus on a lower density regime where motility-induced phase separation is conventionally observed at large Peclet numbers and conduct a numerical investigation into the collective behavior of such deformable cells. We will examine the influence of deformability on phase separation, analyze evolution of cluster size, and explore the structure and dynamics of the dense phases, among other aspects. During our research, we became aware of a relevant study [3]. We also intend to compare our results obtained with a particle-like cells model to their findings using a multi-phase field model.

[References]

[1] Cates, Michael E., et al., *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 6.1 (2015): 219-244.
[2] Saito, Nen & Shuji Ishihara. *arXiv preprint arXiv:2303.03580* (2023).
[3] Hopkins, Austin, et al. *Soft Matter* (2023).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

溶液中の溶質間有効相互作用におけるサイズ効果

（[1]岡山大院自然，[2]岡山大基礎研）○内藤秀文[1]，墨智成[2]，甲賀研一郎[2]

【はじめに】

溶液中の溶質分子間には，溶媒誘起相互作用によって真空中とは異なる有効相互作用が働く．この相互作用は，溶液中の分子集合体形成の駆動力であるほか，水溶液内または生体内におけるタンパク質の構造安定性に重要な役割を果たす．溶質間有効相互作用の強度は，溶液の組成や熱力学条件（温度，密度），溶質の微視的性質（分子サイズ，溶質-溶媒分子間の直接相互作用）等に依存して決まるが，その定量的な理解は十分ではない．本発表では溶質の微視的性質，特に溶質分子サイズ依存性に焦点を絞る．我々は分子動力学(MD)シミュレーションを用いて，溶質間有効相互作用の強度と溶質サイズの定量的な関係性，およびその関係性に対して溶質-溶媒分子間の直接引力相互作用が及ぼす影響を明らかにした[1, 2].

【結果と考察】

溶質無限希釈極限における溶液中の溶質分子間に働く有効相互作用の強度は，溶質間の平均力ポテンシャル $w(r)$，および浸透第二ビリアル係数 B によって定量的に表される．

$$B = -\frac{1}{2}\lim_{\rho\to 0}\int\left[\exp\left[-\frac{w(r)}{kT}\right]-1\right]d\tau.$$

この式で ρ は溶質密度，k はボルツマン定数，T は温度，$d\tau$ は微小体積要素である．$B>0$ は相互作用が斥力的，$B<0$ は引力的であることを意味する．本研究では MD シミュレーションを用いて，水中または Lennard-Jones(LJ)溶媒中で LJ 直径のみが異なる複数の LJ 溶質間の $w(r)$ および B を計算し，$w(r)$の第一極小値と B の σ 依存性を調べた．

水中の LJ 溶質について，B の計算結果を図 1 に示す．この図から，全ての溶質について $B<0$ であり，また σ の増大に伴い B は急激に負の大きな値をとることがわかる．これは引力的な溶質間有効相互作用が，溶質分子サイズ効果のみによって強まることを意味する．また，B と σ の関係を定量化するために $B = A\sigma^{\alpha}$ でフィッティングを行った結果，$\alpha=6$（図 1 の青の点線）または $\alpha = 7$（青の実線）が最適値であることがわかった．発表ではこの σ 依存性に関する理論的な考察のほか，溶質間有効相互作用の σ 依存性に対して溶質-溶媒間の LJ エネルギーパラメータ ε_{uv} が及ぼす影響についても報告する．

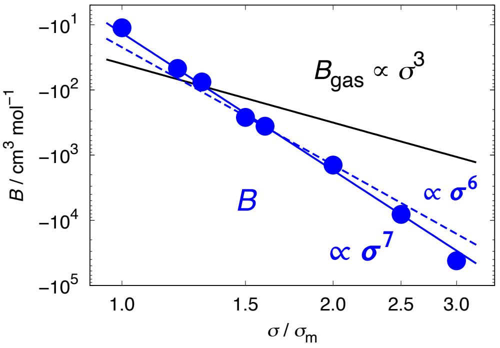


図 1. 水中における LJ 溶質の B の σ 依存性．B_{gas} は LJ 気体の第二ビリアル係数であり，分子直径の 3 乗に比例する．

【参考文献】

(1) H. Naito, R. Okamoto, T. Sumi, and K. Koga, *J. Chem. Phys.* **156**, 221104 (2022).
(2) H. Naito, T. Sumi, and K. Koga, *Faraday Discuss.* in press (2023).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

ゲルの亀裂進展時に前方に発射される弾性波の観測

(東大院工)〇長浦光希、作道直幸、酒井崇匡

【はじめに】

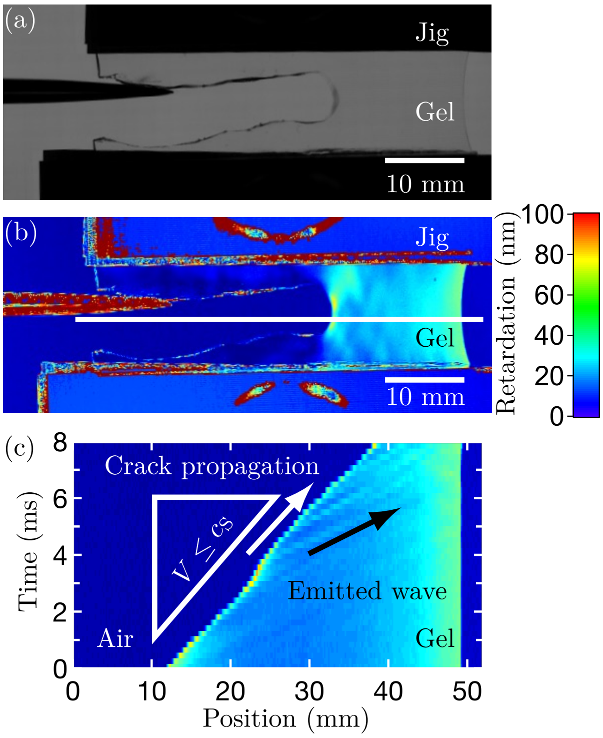
地震は地殻が破壊されることで生じる現象で、地震波の放出を伴う。地震の物理を実験的に調査するにあたって、コントロールされた地震を発生させられないことが問題となる。そこで、地殻の粘弾性特性を模倣して岩石や樹脂の破壊を調査する「labolatory earthquake」の実験[1]が行われてきた。しかし、ガラスや樹脂は弾性率が GPa オーダーと非常に大きいため、亀裂進展速度や弾性波速度が非常に大きく、現象を正確に測定するためには試料のサイズを大きくするか、測定装置の時間分解能を大きくする必要があった。また、破壊の実験は媒質の不均一性に大きく依存するという問題があった。本研究では、剪断弾性率が 10kPa オーダーと非常に小さく、均一で制御可能なゲル[2]を用いることで、従来の問題を解決し、亀裂進展中に亀裂先端から弾性波が前方に発射される様子の可視化に成功した。

【実験手法】

4 分岐星型高分子の AB 型末端重縮合反応により相異なる高分子網目構造を持つ様々なテトラゲル[2]をシート状に作製した。材料を延伸した後に亀裂を与える「静的純剪断試験」を行った。この様子を偏光高速度カメラで撮影し、亀裂進展速度及び亀裂先端から前方に発射される波(発射波)の速度を算出した(右図)。

【結果と考察】

亀裂進展速度はテトラゲルの弾性率[3,4]と質量密度で決まる横波弾性波速よりも小さくなった。また、発射波の速度は横波弾性波速度よりも $\sqrt{3}$ 倍速かった。このことは、本実験の波に対するジオメトリーが一次元問題に帰着されることから説明できる。



(a) ゲルの亀裂進展のスナップショット。延伸させたゲルの左端に初期亀裂を加えることで亀裂を進展させた。(b) 光弾性を利用して (a) における応力分布を可視化した様子。(c) (b) における白線上の応力の時間変化。

【参考文献】

[1] K. Xia, A. J. Rosakis, and H. Kanamori, Science **303**, 1859 (2004).
[2] T. Sakai *et al.*, Macromolecules **41**, 5379 (2008).
[3] Y. Yoshikawa, N. Sakumichi, U. Chung, and T. Sakai, Phys. Rev. X **11**, 011045 (2021).
[4] N. Sakumichi, Y. Yoshikawa, and T. Sakai, Polymer J. **53**, 1293 (2021).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

粘弾性体のき裂進展に関する解析解の構築

([1] 大阪大学, [2] 東京大学) 長滝谷北斗 [1], 作道直幸 [2], 小林舜典 [1], 垂水竜一 [1]

【はじめに】ゴムやゲルなどを薄膜として成形し、一定の負荷を加えた後に端に切れ込みを入れる。負荷が一定以上の場合、き裂が進展し、破断する。き裂進展速度やき裂近傍の応力場やひずみ場、変位場などは破壊の指標として重要である。き裂進展においては、き裂速度の増大に伴いき裂形状が放物形状から乖離し、先鋭化することが知られている [1, 2, 3] が、先鋭化の原因は十分に明らかにされていない。

【結果と考察】本研究では、線形粘弾性体の定常き裂進展の解析解を構築した [4]。下図に示すように、解析解はき裂速度の増大に伴う先鋭化を定性的に再現している。このことは、き裂形状を議論する上で粘弾性が重要な役割を持っていることを示唆している。また、得られた解のき裂面に着目すると、3 つのべき則が存在することが明らかになった。この結果は de Gennes のスケーリング理論である粘弾性トランペット [5] と一致する。したがって、本研究で得られた解析解は粘弾性トランペットに連続体力学的意義を与えるものであると言える。

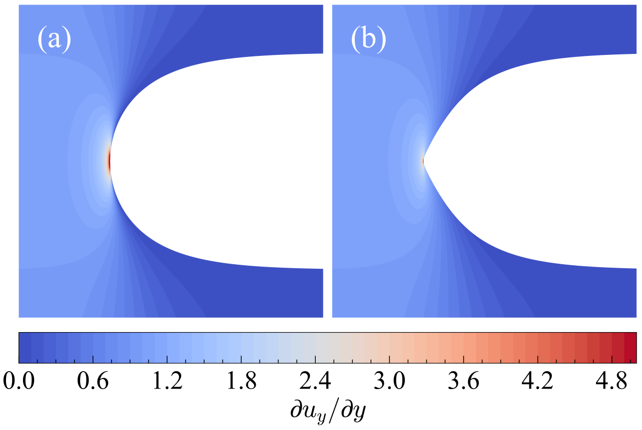


図 1　本結果で構築した解析解を可視化したもの。(a) き裂速度が遅い場合, き裂形状は放物線状になっている。(b) き裂速度が速い場合, き裂形状が放物線から乖離し、尖っている。本研究で得られた解析解はき裂形状の先鋭化を再現している。

参考文献

[1] A. Livne *et al.*, Science **327**, 1359 (2010).
[2] M. Wang *et al.*, Science **381**, 415 (2023).
[3] Y. Morishita *et al.*, Phys. Rev. E **93**, 043001 (2016); Polymer **108**, 230-241 (2017).
[4] H. Nagatakiya, N. Sakumichi, S. Kobayashi, R. Tarumi, in preparation.
[5] P. G. de Gennes, Langmuir **12**, 4497-4500 (1996).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

結合分子による Polymer Collapse のクラスターダイナミクス

（1 東大院総文, 2 東大先進）中西亮[1]、福島孝治[1, 2]

孤立鎖を良溶媒系から貧溶媒系にクエンチしたときの coil-to-globule 転移のダイナミクスは polymer collapse と呼ばれる。ポリマーの平衡状態であるコイル状態やグロビュール状態はよく理解されているが、Polymer Collapse の詳細なダイナミクスは長い間解明されておらず、関心の的であった[1]。polymer collapse のダイナミクスは、タンパク質の折り畳みや染色体ダイナミクスのような生命現象の物理的メカニズムとの関連から興味を持たれてきた。これまでのシミュレーション研究により、ホモポリマーの polymer collapse にはいくつかのステージがあることが分かっている[1, 2]。しかし、特定の生物的な系ごとの詳細はまだ明らかではない。そこで我々は、クロマチンの粗視化高分子モデルの一つである Strings and Binders Switch（SBS）モデル[3]に着目した。SBS モデルの系は、自己回避鎖とその結合分子からなる。このモデルでは、非隣接のポリマーセグメント間には引力ポテンシャルは存在せず、排除体積の斥力相互作用のみが存在する。一方、結合分子はポリマーセグメントに多価的に結合し、離れたポリマーセグメントを橋渡しすることができる。このため、ポリマーの平衡状態は、結合分子の濃度や結合分子とポリマーセグメント間の結合エネルギーに依存して、コイル状態やグロビュール状態をとなる [3, 4]。このような結合分子を介した引力による polymer collapse は、セグメント間に直接引力が働く系とは異なるダイナミクスに従いうる。

本研究では、SBS モデルの分子動力学シミュレーションを行い、Polymer Collapse の際に形成されるクラスターのダイナミクスについて詳細な時系列解析を行い、クラスターの生成や合体の起こる時刻の分布を得た。得られた結果をもとに、SBS モデルの系での Polymer Collapse のステージについて議論したい。

【参考文献】

(1) S. Majumder et al., *Eur. Phys. J. B*, **93**, 142 (2020)

(2) J. Schneider et al., *Macromolecules*, **53**, 20 (2020)

(3) M. Barbieri et al., *PNAS*, **109**, 40 (2012)

(4) A. M. Chiariello et al., *Sci. Rep.*, 6, 29975 (2016)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Molecular dynamics study of long-range spatial correlations in nonequilibrium simple fluids

(Institute for Solid State Physics, University of Tokyo) Hiroyoshi Nakano

[Introduction]

Nonequilibrium systems exhibit a variety of cooperative phenomena that does not occur in equilibrium systems. One example is the occurrence of long-range spatial correlations. Extensive theoretical studies have been performed since the 1980s using driven lattice gases and fluctuating hydrodynamics. These studies have demonstrated that the long-range correlations are a common feature of anisotropic nonequilibrium systems with the conservation law [1]. In addition, experimental observations have confirmed the existence of the long-range correlations in fluids subjected to temperature gradient [2]. Nevertheless, the numerical verification of this phenomenon remains scarce, particularly, in the context of nonequilibrium fluid systems.

[Results and Discussion]

Recently, we attempted to directly observe long-range correlations using molecular dynamics (MD) simulations [3]. We focused on the fluids subjected to temperature gradient (Fig.1 left) or shear flow (Fig.1 right), which are the simplest nonequilibrium setups. By performing the large-scale MD simulations involving about ten million particles, we successfully observed the long-range correlations without ambiguity. Moreover, we found the presence of strong finite-size effects, which makes the numerical verification difficult. We compared the MD results with the theoretical predictions of the fluctuating hydrodynamics and discussed the origin of the finite-size effects.

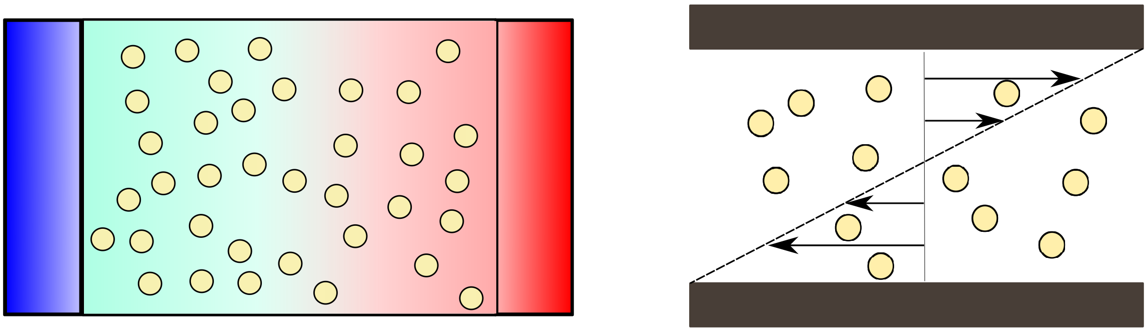


Figure 1. Fluid subjected to temperature gradient (left) and shear flow (right).

[References]

[1] J. R. Dorfman *et al.* Annu. Rev. Phys. **45**, 213 (1994)

[2] C. J. Takacs *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 244502 (2011)

[3] H. Nakano and Y. Minami, Phys. Rev. Research **4**, 023147 (2022), and in preparation

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

結合解離のある 2 体ポテンシャルによる分子のおもちゃモデル

（産総研）中村壮伸

【はじめに】

分子動力学計算で分子を扱う際には古典力場を用いる場合が多い。古典力場の代表的なものとしては CHARMM, AMBER などが挙げられる。古典力場では原子間の結合はシミュレーションの途中で基本的には組み換えられず、結合の組み替えなどを含む化学反応を表現することはできない。 一方、結合の組み替えを含む場合のモデルは反応力場とよばれ、代表的なものとして ReaxFF(1)などが挙げられる。反応力場は量子化学計算に基づいたパラメタと多体の関数形で表現されるものであり、古典分子動力学計算の範囲内で結合の組み替えなどを含む化学反応を定量的に記述する手法である。それと同時に、反応力場は古典力場に比べると計算が重くなってしまうという欠点もある。 さらに古典力場に結合の組み替えを確率的に行う比較的単純なおもちゃモデルもある。この実装方法は複雑な多体ポテンシャルは登場しないが、系のダイナミクスがハミルトニアンだけで表現されていないため、ハミルトン系であることを前提としたさまざまな平衡・非平衡関係式が成り立つ根拠が損なわれてしまう。

【結果と考察】

本研究では単純な 2 体相互作用のみで記述される古典力場でありつつ確率を併用せずハミルトニアンだけで結合の組み替えなどを表現できるおもちゃモデルを提案する。反応力場に比べると化学的意味での定量的な正しさはないが、実装が容易で計算負荷も軽いという利点がある。おもちゃモデルの範囲内で普遍的な熱化学的な問題について分子動力学計算で考える際に役立つはずである。発表ではモデルの詳細と反応を記述できるようにするためのアイデアを述べ、このモデルにより表現されたオリゴマーの結合解離(図 1)について解説を行う。

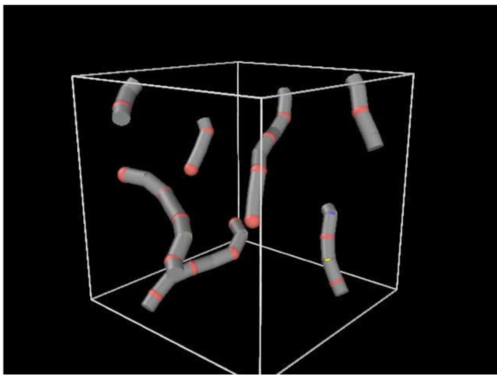


図 1　オリゴマーの模型

【参考文献】

(1) Journal of Physical Chemistry A, Chenoweth, van Duin and Goddard, 112, 1040-1053 (2008).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

二次元数値計算による二層レイリーベナール対流のパターン分岐

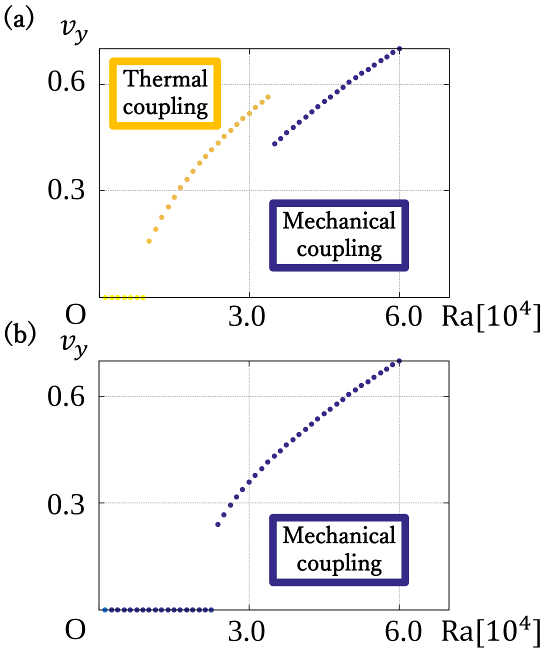
（千葉大院融合理工，千葉大院理 A）中村美月，伊藤弘明 A，北畑裕之 A

【はじめに】

レイリーベナール対流の静止状態から対流状態への分岐現象を調査する分岐パラメタとして，系の特徴的な長さ，温度差，粘性と，熱拡散係数を組み合わせた無次元数であるレイリー数が知られている．地球内部のマントル二層対流や水性二層分離系などの相分離した流体系においても上下面の温度差により，系のレイリー数に応じて各層で対流が発生する．二層レイリーベナール対流の状態は，各層の対流が同じ向きである熱カップリングと各層で対流が逆向きである力学的カップリングに分類される(1)．これまでに実験的研究によってカップリングパターンの分岐には上下層の粘性比が関わっていることが報告されている(2)．本研究では，カップリングパターンの分岐構造を調べることを目的とし，上下層の物性比に依存しないカップリングパターンの変化を調べる研究を行った．

【結果と考察】

二次元モデルを用いた非混和二層系の流体数値計算により上下層境界が slip 条件の場合は，レイリー数を大きくするにつれて静止状態から熱カップリング，力学的カップリングへと転移することが確認された(図 a)．また，この条件下では熱カップリングと力学的カップリングが双安定となる領域があった．一方，上下層境界が no-slip 条件の場合は，レイリー数を大きくすると静止状態から熱カップリングを経ずに力学的カップリングへと変化した(図 b)．当日の講演ではこれらの結果と考察の詳細について発表する．



図：系の垂直な中心軸上におけるv_yの最大値とカップリングパターン
(a)：slip 条件　(b)：no-slip 条件

【参考文献】

(1) P. Colinet and J. C. Legros, On the Hopf bifurcation occurring in the two-layer Rayleigh-Benard convective instability, *Physics of Fluids* **6**, 2631-2639 (1994).

(2) A. Prakash, K. Yasuda, F. Otsubo, K. Kuwahara, T. Doi, Flow coupling mechanisms in two-layer Rayleigh-Benard convection, *Experiments in Fluids* **23**, 252-261 (1997)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

濃厚コロイド懸濁液の緩和過程に与える流体力学的相互作用の影響

（東大生研） 野地　隼平， 古川　亮

【はじめに】溶媒中に分散したコロイド粒子のダイナミクスにおいて、溶媒を介した流体力学的相互作用(HIs)が多くの状況で重要な役割を果たすことが知られている。特に、希薄な濃度の場合、粒子間の HIs は粒子間距離rの-1 乗の関係となり、長距離相互作用として表出する[1]。一方、中間から高密度の領域では、HIs が遮蔽されることが予想される。これは HIs を考慮しないシミュレーションがコロイド系に適用する妥当性を担保するものとされてきた。しかし、この密度領域での HIs の正確な取り扱いは、理論的にも数値的にも極めて難しく、HIs の具体的な役割や遮蔽のメカニズムに関しては十分な理解が得られていない。

本研究では粒子 - 流体ハイブリッドシミュレーション法の一つである Smoothed Profile Method (SPM)[2]と Brownian Dynamics (BD)を用いることにより、HIs の有無が濃厚コロイド粒子系の緩和過程にどのような差異をもたらすかについて調査を行い、中～高密度領域での HIs の役割を再検討する。

【結果と考察】粒径が異なる 2 成分のコロイド粒子系（系全体の密度をnとする）のシミュレーションを実行し、平均二乗変位(MSD)や変位場相関などの様々な動的な物理量について HIs の有無による差異を調査する。本研究では、斥力のみのソフトコアポテンシャルを採用した。シミュレーションから得られた様々な密度($n\sigma_1^3$ =0.56、0.64、0.72)に対する MSD を図 1 に示す。比較的密度が小さい場合、MSD は HIs がある場合に有意な差があり、密度の上昇とともに HIs の有無による差は小さくなる。この結果は、一見すると、密度の上昇による HIs の遮蔽を支持する結果のように見られるが、他の物理量(例えば、中間散乱関数や 4 点相関感受率)について、比較した場合、定性的にも大きな差が観測された。これは、高密度でも単に HIs が遮蔽されるのではなく、非圧縮性などに伴う近接場の HIs が依然として大きな影響を及ぼすことを強く示唆している。

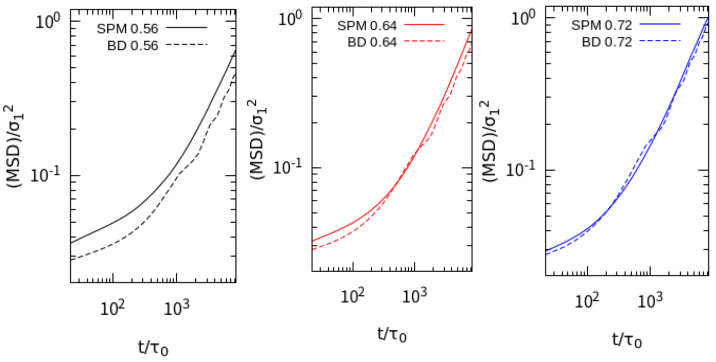


図 1:MSD の時間依存性。実線が SPM の結果、鎖線が BD の結果を表す(左より、それぞれ密度は$n\sigma_1^3$ =0.56、0.64、0.72)。但し MSD および時間は、それぞれ粒子直径σ_1^2と単位時間$\tau_0 = (m_1\sigma_1^2/\epsilon)^{1/2}$で無次元化した。

本発表では、変位場相関などの様々な動的な物理量の測定から考えられる散逸機構の差に由来する緩和ダイナミクスの差と、その背後にある物理的なメカニズムについて説明する。

【参考文献】

[1] M. Doi and S. F. Edwards, The Theory of Polymer Dynamics (Oxford University Press, 1988), 73.

[2] Y. Nakayama, and R. Yamamoto, Phys. Rev. E **71**, 036707 (2005).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

極性溶媒間相互作用のカットオフに対する積分方程式理論

（東大生研）野地　隼平，（量研関西）米谷　佳晃，（新潟大理）吉森　明

【はじめに】生体内または水溶液中のシミュレーションをする際、静電相互作用に対して有限のカットオフ距離よりも遠い場合は相互作用無視する。この場合カットオフ距離が長い程シミュレーションの結果は改善し、Ewald 法の結果に近づくと直感的に考えられる。しかし、直観に反してカットオフ距離を長くする程、Ewald 法の結果と比べて悪化する例が報告されている。例えば最も単純なバルク水[1]や双極子ー双極子相互作用する Stockmayer モデルの純溶媒[2]である。本研究では特に Stockmayer モデルの純溶媒の研究[2]に注目する。約9Å、17Å、28Åの３種類のカットオフ距離を用いてモンテカルロ(MC)シミュレーションが行われており、カットオフ距離28Åの時に双極子の配向に関する異常として溶媒のスナップショットが縞模様に見えることが報告されている。またこの現象を理解するために距離依存の Kirkwood 因子$\mathrm{G_K}(R)$が調べられており、カットオフ距離が長い程$\mathrm{G_K}(R)$の湾曲が大きくなることとの関係性が議論されている。ここで$\mathrm{G_K}(R)$とは距離Rより小さい分子間距離で存在する双極子について内積をとり、それらの総和を統計平均した量である。しかし積分方程式理論などの統計力学的な手法による検証は進んでおらず、カットオフを入れた影響によって溶媒分子間の配向相関のどのように影響するのかは不明である。本研究では双極子ー双極子相互作用する純溶媒に対してカットオフを入れた時の積分方程式を定式化して計算することにより、溶媒分子の配向相関のどこにカットオフが影響するのかを明らかにすることを目的とした。

【結果と考察】MC シミュレーションと同様に、双極子ー双極子相互作用する極性溶媒の系を対象とし、積分方程式で定式化した。極性溶媒は重心に点双極子を持つ溶媒直径σの剛体球とした。一様等方性を仮定することにより、カットオフを入れた影響のみ考慮し、積分方程式を解くために Mean Spherical Approximation[3]を用いた。

MC シミュレーションと同様にカットオフを入れると$\mathrm{G_K}(R)$の湾曲が生じた。計算に用いるカットオフ距離を10σとし、MC シミュレーションと同じ温度、双極子モーメントを用いた。カットオフがない場合(黒点線)は距離Rが大きくなると Kirkwood の g 因子に等しくなるために一定値に収束するが、カットオフを入れた場合(赤実線)は湾曲が生じて一定値に収束しない(図 1)。発表では$\mathrm{G_K}(R)$を含めた様々な双極子の配向に関する量を議論する。

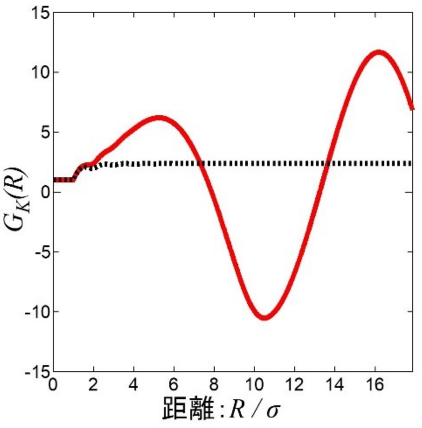


図 1: 距離依存の Kirkwood 因子$\mathrm{G_K}(R)$の距離R依存性。カットオフ距離10σの結果(赤実線)、カットオフなしの結果(黒点線)。σは溶媒直径を表す。

【参考文献】

[1]Y. Yonetani, Chem. Phvs. Lett., **406**, 49 (2005).
[2]Y. Yonetani, J. Chem. Phys. **154**, 044103 (2021).
[3]M. S. Wertheim, J. Chem. Phys. **55**, 4291 (1971).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

ナノ細孔内でのイオン性液晶の相転移とダイナミクス

[1]登弘樹・[1]藤本大輔・[1]吉岡潤・[2]小西隆士・[3]田口健・[1]深尾浩次
([1]立命館大・理工、[2]京大・人間•環境、[3]広大・先進理工)

【はじめに】イオン性液晶(ILC)はアルキル鎖のような配向性を有する液晶分子を含むイオン液体である．ILC は多彩な電気的性質を示すとともに，液晶が示す様々な相転移も示す興味深い系であるため，これまで多くの研究がなされている．Nozaki らは，1-メチル-3アルキルイミダゾリウムとテトラフルオロホウ酸の塩である ILC(ここで，炭素数 n のアルキル鎖を含むこの ILC を[C_n mim]BF_4と表記する)に対して，様々な測定手法を用いてアルキル鎖炭素数 n が 12 の場合に，1)等方液体(I)相からの冷却により，スメクチック(Sm)相から結晶相への相転移が生じる前に，Sm 相と Cr 相の中間的な秩序を持つ準安定相へ変化すること，2)その後の昇温過程で準安定相から結晶相が出現した後，Sm 相，I 相へと相転移することを明らかにしている[1]．一方，Suzuki らはアルミナ細孔中のような拘束条件下において，鎖状分子の結晶化に伴う構造形成機構がバルクとは異なることを見出している[3]．これより，拘束条件下において ILC の示す相転移，構造形成のメカニズムがバルクからの本質的な変化を示すことが期待されている．本研究では，細孔内に拘束された ILC が示す様々な相転移挙動を明らかにすることを目的とし，アルミナ細孔内の[C_n mim]BF_4(n=10,12)に対して，示差走査熱量測定(DSC)，X 線散乱法，誘電緩和測定を行った．

【結果と考察】DCS 測定と X 線散乱法により，n=10 と 12 の場合，I 相は Sm 相に変化し，冷却過程で準安定相に変化した．また，その後の加熱過程では，準安定相は結晶相を経て I 相に変化した．ナノ細孔に閉じ込められた際の転移温度は，Sm 相と I 相の間の転移を除いて，細孔直径の逆数の増加とともに直線的に減少することが明らかになった(図 1)．また，誘電緩和測定によって，準安定相では，α 過程の緩和率はいくつかの温度範囲で Vogel-Fulcher-Tammann 型の温度依存性を示し，そして α 過程のダイナミクスから評価したガラス転移温度は，細孔直径の減少とともに低下し，炭素数また，n の増加とともに上昇することが明らかになった．[C_{10} mim]BF_4の場合，バルクでは結晶相の融点は Sm 相の融点よりわずかに高いが，細孔直径の減少に伴って Sm 相の融点は結晶相の融点より大きく減少することがわかった．このことは，Sm 相が閉じ込め効果により熱力学的に安定な相であることを示唆していると言える．

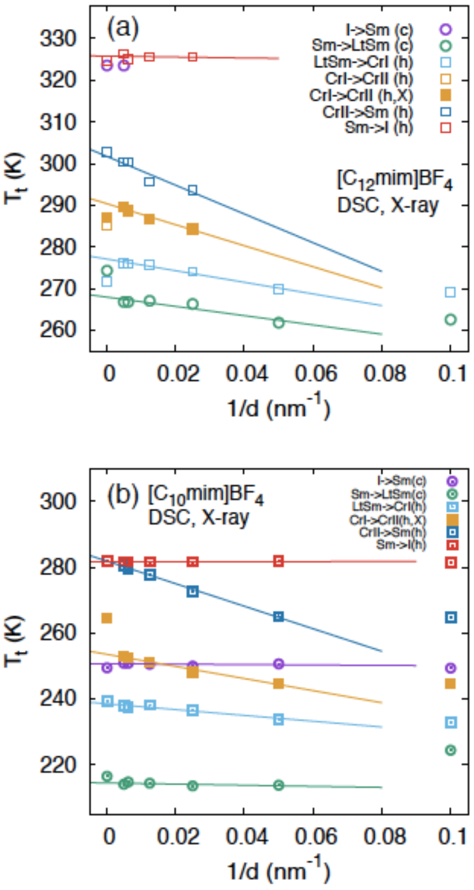


図 1. [C_{12}mim]BF_4(a)と[C_{10}mim]BF_4(b)の相転移温度のアルミナ細孔の細孔直径の逆数依存性

【参考文献】

(1) Y. Nozaki et al., J. Phys. Chem. B, 2016, 120, 5291–5300.
(2) Y. Suzuki et al., Soft Matter, 2013, 9, 2621-2628.
(3) H.Nobori et al., in preparation.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

曲率のあるインデンタによるテープスプリングの曲げ変形

（慶應義塾大学）野村　駿介，佐野　友彦

【はじめに】円筒形シェルの剛性は、工業製品の設計において重要な役割を果たしている[1]。開いた円筒形のシェルやテープスプリングを曲げると、シェルの幾何学的な非線形応答が観察される。小さな変形ではテープスプリングは一様に曲がる。モーメント（三点曲げでは押込み力）が臨界値に達すると、曲げ変形が局所化し、テープスプリングがスナップする。テープスプリングの機械的性能に関する研究は数多くある[2]が、インデンタの幾何形状の影響についてはこれまで明らかにされていない。本研究では，異なる形状のインデンタを用いてテープスプリングの三点曲げ試験を行い、その役割を明らかにする。

【結果と考察】インデンタの曲率半径R_iによって，力変位曲線の振る舞いが大きく異なることがわかった(図(b))。これは押し込みによるテープスプリングのy軸方向の変形が，インデンタの曲率に従って抑制されるからだと考えられる。図(c)は各曲率半径に対する力の最大値をプロットしており，インデンタの形状によってシェルのスナップ特性を制御できることがわかった。

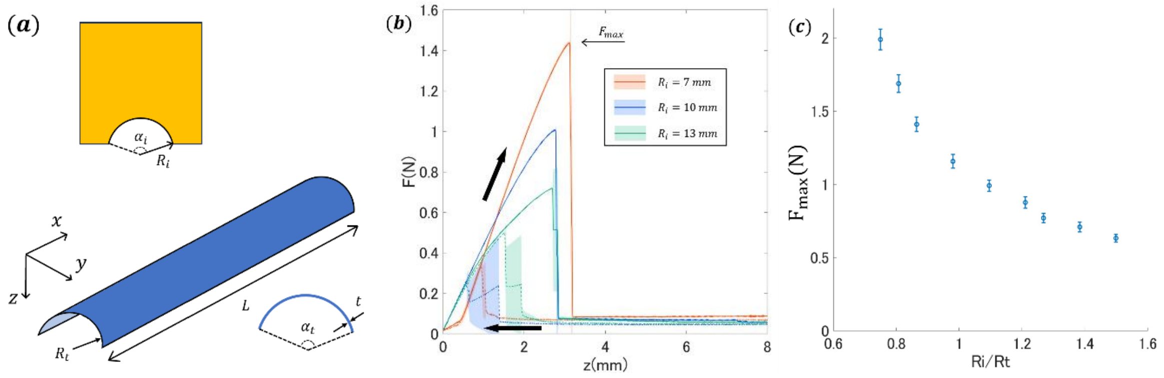


図 (a)実験に用いたインデンタとテープスプリングのモデル図。(b)一定の曲率のインデンタを用いて三点曲げ試験を行った時の力変位曲線。インデンタがテープスプリングと接触した状態を $z = 0$ として，一定距離押し込み，再び元に戻す。実線が順路，破線が復路である。同じ曲率半径のインデンタで 3 回実験を行い，その平均値とエラーバーをプロットしている。(c) 各R_iでの曲げ試験(順路)での最大荷重の曲率依存性を示す。横軸はインデンタの曲率半径R_iをテープスプリングの曲率半径R_t (R_t~$8.67mm$)で無次元化している。

【参考文献】

[1] F. Dewalque et al., “Mechanical behaviour of tape springs used in the deployment of reflectors around a solar panel”, Acta Astronautica, vol.123, pp.271–282, 6 2016.
[2] C. R. Calladine et al., “Folding the carpenter’s tape: Boundary layer effects,” Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME, vol. 87, 1 2020.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

アクティブサスペンションの異常レオロジー

（東大工）早野陽紀

【はじめに】アクティブマターとは，内部に貯蔵されたエネルギーをその物体が内包する機関により力学的エネルギーに変換し，能動的に移動・変形を行う物体全般を指し，この定義は動物や魚といったマクロな物体から微生物や細胞骨格等のマイクロメートルオーダーの生物系を含んでいる。中でも，大腸菌などの数マイクロメートルの遊泳微生物はマイクロスイマーと呼ばれ，近年多くの研究者の注目を集めている。大腸菌等の自らの周囲に溶媒を前後に押し出す流れ場を誘起する遊泳微生物（pusher 型マイクロスイマー）が水中に分散した系（アクティブサスペンション）では，その粘性が溶媒粘性を下回ることが実験で観測されており，特定の条件下ではゼロ粘性の超流動状態にまで至る[1]。

この粘性減少のメカニズムについて様々なモデルが提案されてきたが，十分な理解が得られたとは言い難い。マイクロスイマー間の流体力学的相互作用は，系のレオロジー，輸送特性に強い影響を及ぼすと考えられてきたが，その取扱いの難しさから従来の研究では十分に考慮されていなかった。本研究では，流体力学的相互作用の効果を詳しく検討するため，粒子と溶媒の運動を並列して計算する手法であるハイブリッド・シミュレーションの一種である SPM(Smoothed Profile Method)[2]を用いて，数値計算によるアプローチを行った（図１）。

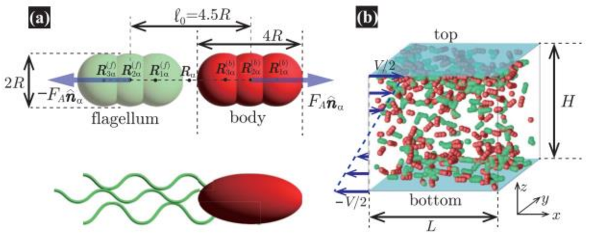


図 1 **(a)** pusher 型のモデルスイマー **(b)** シミュレーションシステム [H. Hayano and A. Furukawa, Phys. Rev. Research 4 043091.]

【結果と考察】粘性の計算結果は，低剪断率の領域で粘性が溶媒粘性を下回り，実験で観測されている結果が定性的に再現された。また，粘性が減少するためにはスイマーが伸長軸方向へ配向する必要があり，本研究で行った数値計算ではこれも確認された。この伸長軸方向への平均的な配向の機構として，従来の理解では，剪断流れと他のスイマーから受ける有効的なゆらぎの結合によってもたらされると説明していた。一方で本研究[3]では，スイマー間の溶媒を介した衝突 - 散乱を解析することで，スイマーが衝突後に優先的に伸長軸方向に遷移することを示し，スイマー間の流体力学的相互作用が異常粘性に対して果たす役割を明らかにした。発表では，シミュレーションの詳細と，衝突 - 散乱過程において伸長軸方向が優先的に選択される機構を説明する。

【参考文献】

(1) H. M. López, J. Gachelin, C. Douarche, H. Auradou, and E. Clément, Phys. Rev. Lett. **115**, 028301 (2015).
(2) Y. Nakayama and R. Yamamoto, Phys. Rev. E **71**, 036707 (2005).
(3) H. Hayano and A. Furukawa, Phys. Rev. Research **4** 043091 (2022).

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

コロイド拡散解析が導く相分離ゲルの不均一構造

（東京大学 総合文化研究科）原 健己，柳澤 実穂

【はじめに】

高分子ゲルとは、高分子がつくる網目構造の中に多量の溶媒を保持した物質のことである。柔らかな合成高分子であるポリエチレングリコール（PEG）からなるゲルでは、欠陥のない均一な高分子網目が形成され、網目構造と力学特性の相関関係が説明された(1)。一方、ゼラチンやアガロースなどの生体高分子ゲルは、高い生体親和性により医薬品や食品の材料として汎用されているが、不均一な高分子網目が形成されて、定量的な力学特性の制御が容易ではない。その理由として、生体由来のために高分子の分子量が多分散であることに加え、ゲル化に伴う高分子と溶媒の親和性の低下が挙げられる。例えば、温度低下に伴いゲル化するアガロースゲルでは、ゲル化温度以下で高分子と溶媒の相分離が生じる(2, 3)。しかし、相分離過程とゲル化過程が同時に進行する徐冷過程で、構造がどのように決定されるかまだよく理解されていない。そこで本研究では、アガロース水溶液にマイクロメートルサイズのコロイドを添加し、温度低下に伴うコロイドゆらぎの時空間解析から、ゲルの不均一網目の形成機構を明らかにすることを目的とした。

【結果と考察】

はじめに、アガロース水溶液のゲル化点を決定するため、マクロ粘度計を用いてアガロース水溶液の粘度のせん断速度依存性と温度依存性を確認した。高温ではせん断速度に非依存であり、アレニウス則が成り立つ一方で、ある温度を境にせん断速度依存性がみられ、アレニウス則から逸脱した。この逸脱が見られた温度をゲル化温度 T_g と定義した。次に、位相差顕微鏡の透過光画像とフーリエ解析を用いることで、ゲル化温度以下への急冷により生じる不均一構造サイズを解析した。構造サイズは、急冷温度が下がるにつれて約 7 μm から約 4 μm へ減少した。最後にコロイドをアガロース水溶液中に分散させて、T_g 以下への徐冷に伴うコロイドゆらぎを解析した。コロイドの拡散係数のマッピングから空間の不均一性を見積ったところ、上記の画像解析から得られた不均一構造サイズとの対応が見られた。また、ある時間幅 Δt における移動距離 Δx の分布についても解析を行なった。T_g に対して十分に高温と低温の領域では 1 つのガウス分布でフィットできる一方で、ゲル化温度付近では２つのガウス分布の重ね合わせとなった。これは、高温と低温では、コロイドが感じる周辺環境は等方的であり、よってブラウン運動となるが、T_g 付近では相分離を伴って空間非等方となり高分子が多いゲル領域と溶媒が多いゾル領域という異なる２つの領域を強く感じている可能性がある。

【参考文献】

(1) Y. Yoshikawa, et al., Phys. Rev. X, 11:011045, (2022)
(2) T. Morita, et al., AIP Advances, 3, 042128 (2013)
(3) M. Tokita, et al., Soft Matter, 19:7379 (2023)

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

枝葉をもつ樹木の振動特性

（東京大学大学院　農学生命科学研究科）藤原英明、山口哲生

【はじめに】

枝葉をもつ樹木の振動は、枝の分岐の仕方や葉の配置などの樹木全体の形状によりその特性が異なる。その振動特性を調べるためのモデル化の方法として、図 1 (a)のように幹や枝を質点とばねとダンパーによって構成された系に単純化する方法があり、その様な方法で樹木全体の大まかな形状について振動特性を調べる先行研究が多く存在する[1-3]。その様なモデルは枝の弾性や枝葉の空気抵抗による減衰を表現できるものの、枝が生えている位置や枝の生えている角度などの枝葉の配置に関係するパラメーターによる振動特性への影響が不透明になっている。また、その様な配置による影響を調べた先行研究は少ない。

本研究では、樹木の枝葉の配置を考慮したモデルを梁の動弾性理論に基づいて構築し、図 1 (b)のように幹と枝葉のパラメーターを指定することで樹木の振動特性を再現し予測することができるモデルを得ることを目的としている。

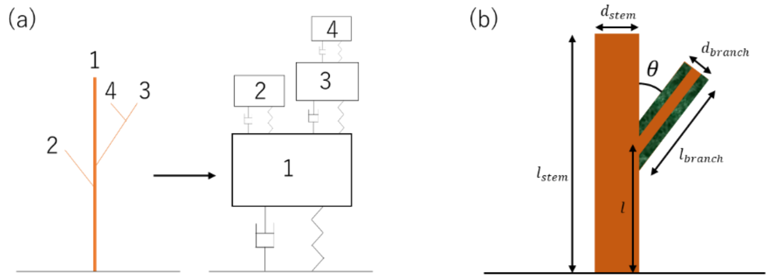


図 1. (a)ばね質点ダンパー系へ単純化したモデル (b)本研究の目指すモデル

【結果と考察】

樹木の曲げ変形に関する動的な挙動は偏微分方程式を用いて表される。本研究では幹と枝を適当な境界条件により接続し、周期的な挙動を解析的に求めた。いま、図 1 (b)のように幹に枝が一本だけ生えており、葉による空気抵抗が枝に働いているモデルを想定し、幹の根元に水平振幅 Y_0の周期的な振動を加え、幹の頂上の振幅 A に関する周波数応答を調べる。一例として枝の直径・長さ・角度を固定し、パラメーターのうち枝の付いている高さℓのみを変えた時の結果を図 2 に示す。高い位置に枝が生えているほど、幹の振幅はよく抑えられることがわかった。この結果は樹木の振動において枝の配置が本質的であることを示唆している。当日は、多数の枝を配置した場合の周波数スペクトルについて議論を行う予定である。

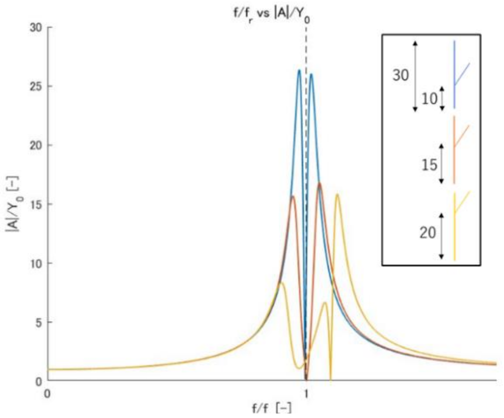


図 2 周波数応答解析（横軸は加振振動数 fを幹の一次の共振振動数 f_rで、縦軸は幹の頂上の振幅 A を Y_0で無次元化）

【参考文献】

[1] H.- C. Spatz, B. Theckes, *Plant Science* 207, 66-71 (2013).

[2] K. James, *Journal of Arboriculture* 29,165-171 (2003)

[3] J. Senden, et al., *Computers and Electronics in Agriculture* 196,106860 (2022)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

分散媒の硬化過程におけるコロイドの凝集

（大日本塗料（株）、都立大物理）古田祐二朗
（都立大物理）栗田玲

【はじめに】

水などの化学的に安定な溶媒が分散媒のコロイド分散系は、古くから研究されている。分散媒が化学反応により高分子化し、ゲル化するコロイド分散系は、塗料や接着剤として工業的に用いられているが、分散媒の硬化過程でのコロイドの分散状態の変化についてほとんど研究されていない。コロイドは塗料や接着剤中では主に機能付与の役割で使用されており、硬化後のコロイドの分散状態により力学特性や機能性が変化することが知られている[1,2]。硬化過程でのコロイドの分散状態の変化を理解することは、工学的に非常に重要である。

コロイドを含まないオリゴマーの硬化過程に関しては研究されており、硬化過程で不均一な架橋ネットワークを形成し、動的不均一性を示すことが確認されている[3, 4]。不均一なネットワーク中にコロイドが存在した場合、コロイドの凝集を誘起することが懸念される。そこで、硬化過程で形成される不均一な架橋ネットワークがコロイドの分散状態に与える影響を調べるため、MDシミュレーションにより硬化過程でのコロイドの分散状態の変化を研究した。

分散媒は粒径σ_sの粒子、コロイドは粒径σ_lの粒子とし、粒径比$\sigma_l/\sigma_s = 5$とした。粒子間ポテンシャルは WCA ポテンシャルを用いた。硬化反応は、確率により結合生成するモデルを採用しており、一定の範囲内にいる分散媒粒子間において確率$P_r = 0.003$で結合を生成する。結合した分散媒粒子間には、バネ相互作用が働く。分散媒粒子は分散媒 A、B の 2 種類存在し、結合の生成は A,B 間でしか生成しないとした。硬化率α（反応した官能基数/全官能基数）が 0.9 以上になるまで計算した。コロイドの体積分率$\phi = 0.0366$とした。

【結果と考察】

横軸を硬化率αとした硬化過程でのコロイド中心間距離d_{cc}の変化を図. 1 に示す。これより、$0.4 < \alpha < 0.6$においてコロイドが接近しやすい傾向にあり、また最終的に凝集するかどうか分岐する様子が確認された。この硬化過程シミュレーションを 156 サンプル実施し、105 サンプルで凝集した。凝集確率は 0.67 であることから凝集しやすい傾向にあることが言える。この凝集しやすい傾向の起源を明らかにするため、コロイド粒子間に働く有効ポテンシャルを各硬化率で算出した。当日は、有効ポテンシャルの結果も併せて発表する。

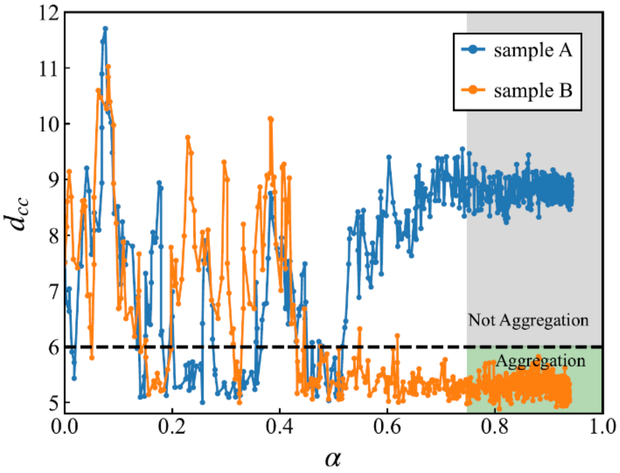


図.1 硬化の進行に伴うコロイド中心間距離$\boldsymbol{d_{cc}}$の変化。代表的な 2 つのサンプルを示しており、sample B のような凝集が 0.67 の確率で発生した。

【参考文献】

[1] J. Oberdisse, *Soft matter* (2006).

[2]R. Farahani, *et. al.*, *Materials & Design* (2015).

[3] T. Hoshino, *et al.*, *Scientific reports,* (2021).

[4] S. Yamamoto, *et al., Macromolecules* (2023).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

境界存在下でバクテリア乱流が示すエッジカレントの振動について

（九大院理）<u>松清 洋輝</u>，福田 順一

【はじめに】

バクテリアは，アクティブマターのモデル生物としてよく研究されている．特に高濃度のバクテリア懸濁液が示す時空カオス的な振る舞いはバクテリア乱流と呼ばれ，特徴的な渦サイズを持つなど，古典的な乱流とは異なる特徴を持つ現象として近年注目を集めている．このバクテリア懸濁液を容器に閉じ込めることによってバクテリア乱流のカオス的な振る舞いを制御しようという研究が多く行われており，その際エッジカレントと呼ばれる，境界に沿うように泳ぐバクテリアの運動が重要であることがいくつかの実験において指摘されている（文献(1), (2)など）．一方で，バクテリア乱流の振る舞いを記述する連続体方程式である Toner-Tu-Swift-Hohenberg（TTSH）方程式（文献(3)）の，境界存在下でのシミュレーションはいくつかの先行研究において行われているが，いずれも non-slip 境界条件を用いたものであり，上に述べたエッジカレントを実現できていなかった．そこで本研究では，slip 境界条件下での TTSH 方程式のシミュレーション手法を開発し，境界条件がバクテリア乱流のダイナミクスに及ぼす影響を調べた．

【結果と考察】

シミュレーションの結果，エッジカレントを実現することができ（図１），さらにエッジカレントの向きが時間的に振動することを発見した（図２）．円形容器，平行な二つの壁，円形障害物の 3 通りのジオメトリのもとでシミュレーションを行い，それらのいずれでもエッジカレントの向きが振動することを確認した．さらに，エッジカレント振動の振動数について，移流の強さ，容器の半径，すべり境界条件のずり係数への依存性を調べた．

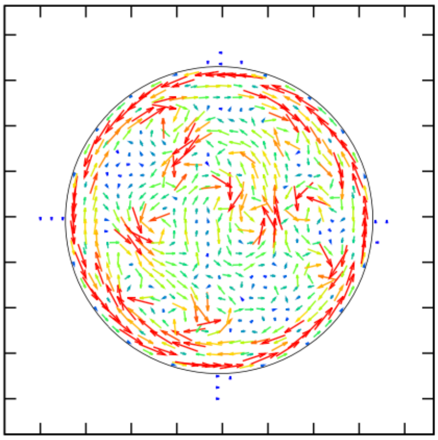


図１：速度場のスナップショット．

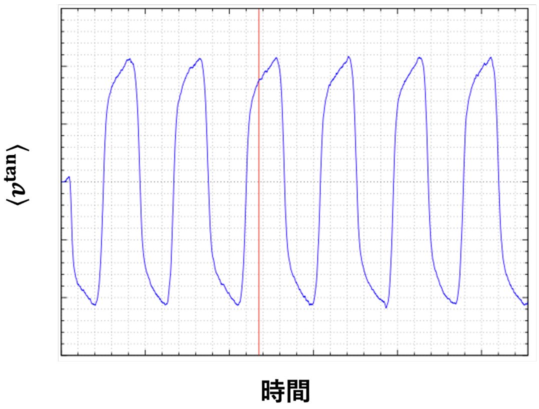


図２：エッジカレントの向きを表す量$\langle v^{\tan} \rangle$の時間発展の様子．$\langle v^{\tan} \rangle > 0\ (< 0)$が左回り（右回り）のエッジカレントに対応する．赤線は図１のスナップショットを取得した時刻を表す．

【参考文献】

(1) Wioland, Hugo, et al., *Nature physics* 12.4 (2016): 341-345.
(2) Beppu, Kazusa, et al., *PNAS* 118.39 (2021): e2107461118.
(3) Wensink, Henricus H., et al., *PNAS* 109.36 (2012): 14308-14313.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

DNA ネットワークで支持されたエマルションの吸引に対する力学的応答

○増田和俊 [1]，柳澤実穂 [1,2] (東大教養 [1]・東大院総合文化 [2])

【はじめに】

リン脂質膜で覆われた油中液滴やリポソーム(以下、人工細胞)は、生細胞の物理的理解や医薬用カプセル等への応用に向けて研究されている一方で、細胞骨格のような膜の補強構造をもたないため、脆弱性が応用上の課題となっている。我々はこれまでに、内膜直下に自己組織化した DNA ネットワーク(Fig.1a)を有する人工細胞は力学的に補強されることを報告した[1]。しかし応用を考える上では、人工細胞の力学特性についてネットワークの構造と関連させながらより詳細に調べることが不可欠である。そこで本研究では、異なる分岐数を持つ DNA ナノ構造体により DNA ネットワークを設計し(Fig.1b)、それらを膜直下に有する人工細胞の力学測定を行った。

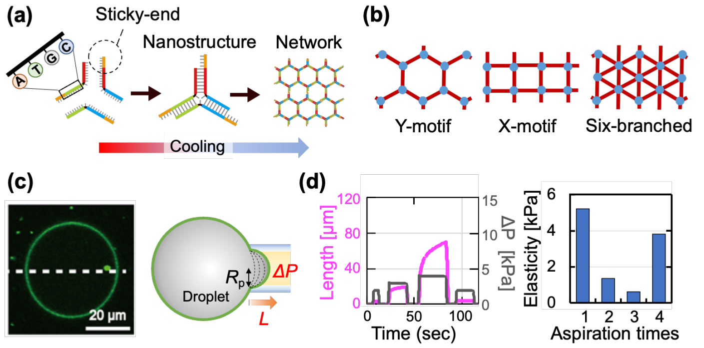


Fig.1 (a)温度冷却に伴い自己組織化する DNA ネットワーク(b)様々な種類の DNA ナノ構造体からなるネットワーク。適切な配列と本数のオリゴマーを用意することで様々な分岐数の構造体を作成することができる。(c)DOTAP 液滴内部での DNA ネットワーク。FAM ラベルにより緑色蛍光を有している。静電相互作用によりカチオン性の DOTAP 膜直下に DNA ネットワークは存在している(左)。マイクロピペット吸引法の模式図(右)。吸引圧と吸引長の関係から力学特性を推定することができる。(d)時間と圧力、吸引長の関係(左)と各吸引時の弾性率の値(右)。測定には X-motif (Sticky-end8)を使用した。吸引圧を増加すると吸引長が時間に依存して長くなる粘性領域が見られるようになり、弾性率は低下する。一方、一度弾性率が低下しても再度弾性が支配的に見られる領域の圧力で吸引すると弾性率は回復する。

【結果と考察】

負に帯電する DNA ネットワークを正に帯電する脂質(DOTAP)膜で覆われた液滴に内包することで、DNA ネットワークで内側が覆われた人工細胞を形成した(Fig.1c)。これをマイクロピペットで吸引し(Fig.1c)、吸引圧力 ΔP と吸引長 ΔL が線形応答する微小変形領域から弾性率 E を得た(Fig.1d)。

サイズがほぼ等しい人工細胞に対して、異なる内径 R_p をもつキャピラリーを用いて E を求めたところ、R_p が約 5 μm より小さい時に E が急激に上昇することを見出した。これは、DNA ネットワークが静電相互作用により膜結合することで、通常の一本鎖 DNA の持続長(2nm, [3])よりも遥かに長いマイクロメートルオーダーの持続長をもつ可能性を示唆する。また、分岐数の異なる DNA ネットワークはその弾性率そのものだけでなく、むしろそのレジリエンスに違いをもたらす可能性がある。我々は Rp の約 10 倍程度の長さ吸引した直後と緩和後 5 分ないし 10 分程度経ってから計測した弾性率を比較した。その結果、構造崩壊に伴い低下した弾性率が再び上昇する様子が見らえた。これらはモチーフの構造に起因するものであり、DNA ネットワークの残基が影響している可能性を示唆している。得られた力学特性を膜直下に形成された DNA ネットワーク構造から説明するために、現在電子顕微鏡を用いた油中液滴内部での DNA ネットワークの構造の観察を試みている。

【参考文献】

[1] Kurokawa, C. *et al.*; (2017). PNAS, 114(28), 7228-7233.
[2] Q. Chi, *et al.*; (2013). Physica A.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

振盪によるα-シヌクレイン線維化メカニズムの解明

（都立大物理）向井 優里彩、栗田 玲
（都医学研）野中 隆

【はじめに】

2023 年の高齢者人口は総人口の 29.1%と過去最高の値となり、日本では高齢化が社会問題になっている。高齢化に伴い、加齢が最大因子である認知症患者数も増加傾向にある。そこで三大認知症の中の 1 つであるレビー小体型認知症に着目し，研究を行っている。レビー小体型認知症の根本的な治療法はまだ見つかっておらず、治療法確立のためにも発病までのプロセスの究明が必要である。レビー小体型認知症はレビー小体が原因とされており、レビー小体の主成分はα-シヌクレインと呼ばれるタンパク質のアミロイド線維である(1)。このα-シヌクレインは振盪するだけで線維化することが経験的に知られている。本研究では、振盪によるα-シヌクレインの線維化のメカニズムを解明することを目的とした。

【結果と考察】

α-シヌクレインを調製し、37℃で一定に振盪しつづけ、線維化を観察した。野生型（WT）α-シヌクレインと A53T 変異型α-シヌクレインの 2 つの線維化過程を 4 日間観察した。WT は 3 日目、4 日目に線維化が観察でき、A53T は 2 日目、3 日目、4 日目に観察できた。振盪することで，どちらのα-シヌクレインも線維化することが確認できた。さらに、線維化と振盪速度の関係を調べるために 0rpm から 1000rpm の間で振盪速度を変えて線維化するかどうかを調べた。振盪が遅いと線維化は見えなかったが、振盪速度がある値から大きくなると線維化が観察できるようになった。このことから、線維化するための振盪速度には閾値が存在している可能性が示唆された。

本発表では，これらの結果や考察について報告する。

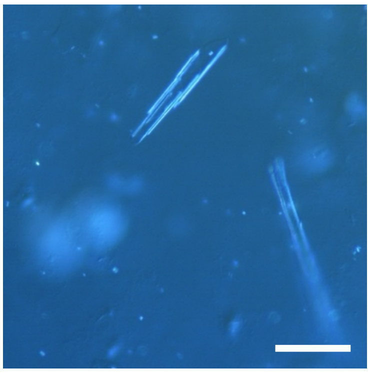


図 1. α-シヌクレインの線維化の様子（A53T α-Syn, 750 rpm で振盪。スケールバーは 50 μm を表す。）

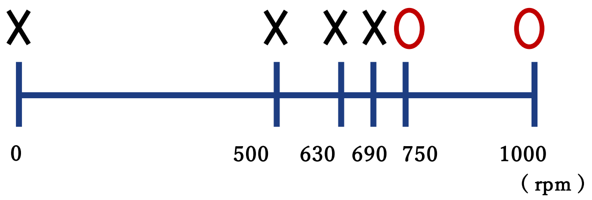


図 2. α-シヌクレイン(A53T)の線維化と振盪速度の関係（×は線維化が観察できなかったとき、○は線維化が観察できたときを表す)

【参考文献】

(1) Stefanis, L. α-Synuclein in Parkinson's disease. *Cold Spring Harb. Perspect. Med.* 2, a009399 (2012)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

奇弾性ネットワークの状態遷移に関するエントロピー変化

（京都大学 数理解析研究所）安田　健人

【はじめに】

酵素のような微小な分子機械はエネルギーのやり取りを介して構造変化する。このような非平衡微小機械の構造ダイナミクスを記述するために奇弾性ネットワークモデルが提案されている[1]。奇弾性は弾性行列の反対称成分を意味し、弾性体へのエネルギー注入を表現する[2]。本研究では奇弾性ネットワークモデルの状態遷移を考え、それに伴うエントロピー変化およびそのキュムラント母関数を計算した。

【モデルと結果】

微小機械の状態はN要素のベクトル$\boldsymbol{x}$で記述でき、その動力学は以下の奇弾性ネットワークモデルに従う(図 1(a))。

$$\dot{\boldsymbol{x}} = -\ell k\bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{K}}\boldsymbol{x} + \bar{\mathbf{F}}\boldsymbol{y}(\boldsymbol{t})$$

ここでℓは輸送係数、$\bar{\mathbf{L}}$は輸送行列で正定値対称行列である。kは弾性係数、$\bar{\mathbf{K}}$は弾性行列を表す。弾性行列は対称成分$\bar{\mathbf{S}}$と反対称成分$\bar{\mathbf{A}}$に分解すると、$\bar{\mathbf{K}} = \bar{\mathbf{S}} + \lambda\bar{\mathbf{A}}$となり、$\lambda$は奇弾性の強さを表す。$\bar{\mathbf{F}}$はゆらぎの振幅を表し、揺動散逸定理$\bar{\mathbf{F}}^T\bar{\mathbf{F}} = 2k_BT\ell\bar{\mathbf{L}}$に従う。ここで$k_B$はボルツマン定数、$T$は熱浴の温度である。$\boldsymbol{y}(t)$はガウスノイズであり$\langle\boldsymbol{y}(t)\rangle = \mathbf{0}, \langle\boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}(0)\rangle = \bar{\mathbf{I}}_{\mathbf{N}}\delta(t)$を満たす。時刻$t_f$までの奇弾性ネットワークモデルの熱浴エントロピー変化Δsは以下のように与えられる。

$$T\Delta s = -k\int_0^{t_f} dt\,\dot{\boldsymbol{x}}^T\bar{\mathbf{K}}\boldsymbol{x}$$

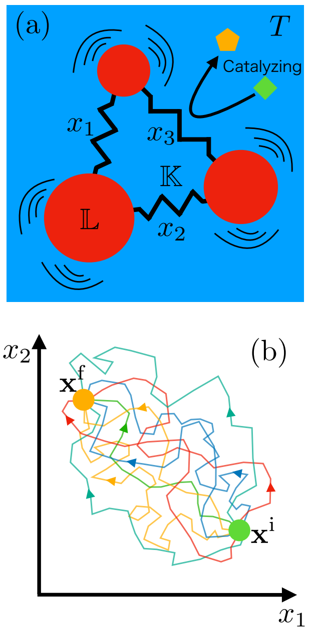


図　1 (a)微小機械モデルと奇弾性ネットワーク。(b)確率的な遷移経路

ここで状態遷移$\boldsymbol{x}^i \rightarrow \boldsymbol{x}^f$を考えると、その経路は Onsager-Machlup 積分[3]によって決定される経路確率に従って、ランダムに分布する(図　1(b))。それに伴い、エントロピー変化も確率的になり、そのキュムラント母関数は Onsager-Machlup 積分の最適化問題(Varadhan theorem [4])から計算する事ができる。この最適化問題を解くために、極値条件方程式を導出した。これを初期状態$\boldsymbol{x}^i$と最終状態$\boldsymbol{x}^f$を境界条件としてことで、遷移の最頻経路を求めた。この最頻経路の性質からキュムラント母関数を計算した。その結果、奇弾性λは高次のキュムラントに重要な影響を与え、エントロピー変化の平均及び分散を増大することが示された。

【参考文献】

[1] A. Kobayashi, K. Yasuda, K. Ishimoto, L.-S. Lin, I. Sou, Y. Hosaka, and S. Komura, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 074801 (2023).

[2] C. Scheibner, A. Souslov, D. Banerjee, P. Surówka, W. T. Irvine, and V. Vitelli, Nat. Phys. 16, 475 (2020).

[3] L. Onsager and S. Machlup, Phys. Rev. 91, 1505 (1953).

[4] H. Touchette, Physics Reports 478, 1-69 (2009).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

べき的なサイズ分布をもつ多分散高分子水溶液のレオロジー

（東大総合文化）柳沢直也，嶋本大祐，柳澤実穂

【はじめに】

生物細胞内に含まれる分子は，水分子(~nm)から染色体(~μm)までの極めて大きなサイズ分布を有している．このような多分散系がもつ特有な性質を理解するために，最近嶋本らは，粒子サイズがべき分布となる非熱的な２次元粒子系を調べたところ，サイズ多分散性がある特定領域では，接触粒子数分布が共通の性質もつ，ジャミング転移点が上昇するといった，多分散系特有の性質が現れることが明らかにした[1]．ゆえに，高分子のような熱的な粒子(分子)系においても，多分散系特有の性質が存在することが期待される．ごく最近我々は，ゲル透過クロマトグラフィーによる分子量分布測定から，市販の線状高分子であるポリエチレングリコール(PEG)が，ある程度の分子量の幅をもっていることに着目し，複数種類の PEG を適当な割合で足し合わせることで，分子量分布がべき分布に従う($\propto M^{-a}$)高分子の作製に成功した(図 1)．そこで本研究では，べき分子量分布をもつ PEG 水溶液のレオロジー測定を行うことで，多分散高分子系特有の性質の解明に迫る．

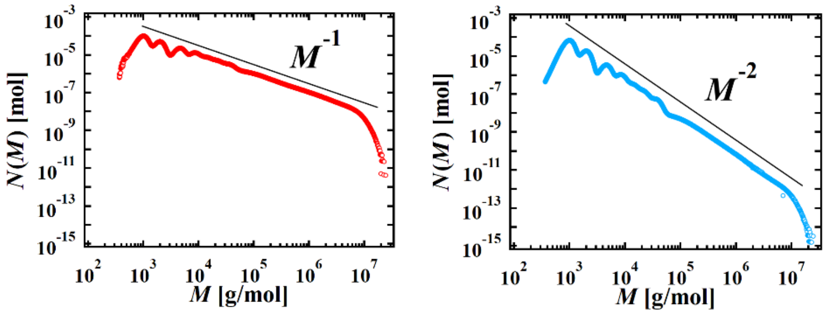


図１：べき指数 a = 1(左)と，a = 2(右)をもつ多分散 PEG の分子量分布．

【結果と考察】

べき指数 a の異なる PEG を作製し，PEG 水溶液の粘度のせん断速度依存性を調べたところ, a > 2 ではニュートン流体, a < 2 ではシアシニングを示すことがわかった(図 2)．また，べき分布に従う最大の分子量 M_{max} と a の関係を調べたところ, $M_{max} > 10^5$ g/mol かつ a < 2 の場合にシニングが起きることを確認した．さらに，シニングを特徴付ける解析を行ったところ，ある特定の指数では，せん断による長鎖成分の引き伸ばし[2,3]だけでは説明できないシニングのふるまいを示すことがわかり，多分散系特有の性質の存在を示唆する結果が得られた．本発表ではこれらの詳細に加え、複素弾性率測定の結果も交えて，多分散高分子水溶液のレオロジー特性について議論する．

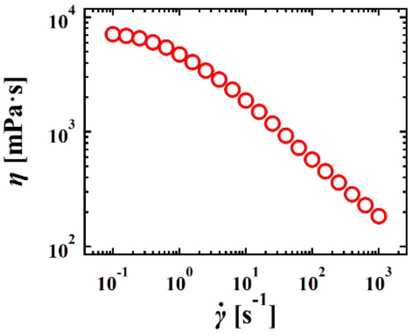


図２：べき指数 a = 1 の 5wt% 多分散 PEG 水溶液における粘度のせん断速度依存性．

【参考文献】

(1) D. S. Shimamoto and M. Yanagisawa. *Phys. Rev. Res.* **5**, L012014 (2023)
(2) K. W. Ebagninin *et al. J. Colloid Interface Sci.* **336**, 360–367 (2009)
(3) E.G. Blanco-Díaz *et al. J. Mol. Liq.* **268**, 832–839 (2018)

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

微視的ビリアル圧力が均一な準剛体球ガラスの脱ガラス化

（京都大学　理学研究科　ソフトマター物理学研究室）柳島大輝

【はじめに】

ガラスのエイジング機構の解明はアモルファス材料の機能劣化防止や内部構造の制御等の観点から急務である[1]。超低温まで急冷した準剛体球ガラスでは断続的な変化が見られ、その「雪崩型」[2]の変位は先行研究で検証されてきた。近年、局所密度の不均一性を人為的に抑制した同準剛体球の「均一ガラス」(uniform glass)で自発的なエイジングが強く抑制されていることが確認された[3]。ガラスの超安定性を構造起因の性質に繋ぐ有効な手掛かりと位置付けることができる。しかし uniform glass は単分散の準剛体球ガラスを起点とした単成分系以外では適応できない。例えば二成分の Lennard-Jones 系では各成分の平均局所密度が大きく異なり、局所密度のみを均一化してもエイジング耐性は発現しない。単成分系では適応可でも局所密度そのものはガラスの微視的安定性において本質的な役割を果たしていないことが分かる。そこで機械的安定性に直接関係する微視的ビリアル圧力の均一化を使った pressure uniform glass (PUG)相を作成して脱ガラス化を検証した。

【結果と考察】

本研究では二成分の Lennard-Jones 系（Wahnstrom mixture）を用いて反復的に各粒子の粒径σ_iを$\Delta\sigma$変更しながら FIRE 法を用いて inherent structure を求めていく[図 1]。エネルギー最適化後に局所圧力の標準偏差が増えていた場合$\Delta\sigma$を小さくする。このアルゴリズムにより局所圧力が元の系の 10 分の一で各成分の粒径分布が 10%弱程度広がったガラスが完成する。

新しい PUG 相と元のガラス相に同じ heat ramp を与えて二乗変位を求めた。すると元のガラス転移温度より遥かに高い温度で脱ガラス化が起こることが確認された。均一かつ急激な融解は ultrastable glass 特有の振る舞いであり[4]、ビリアル圧力の均一性が安定性の起源に密に関わっていることが示唆される。

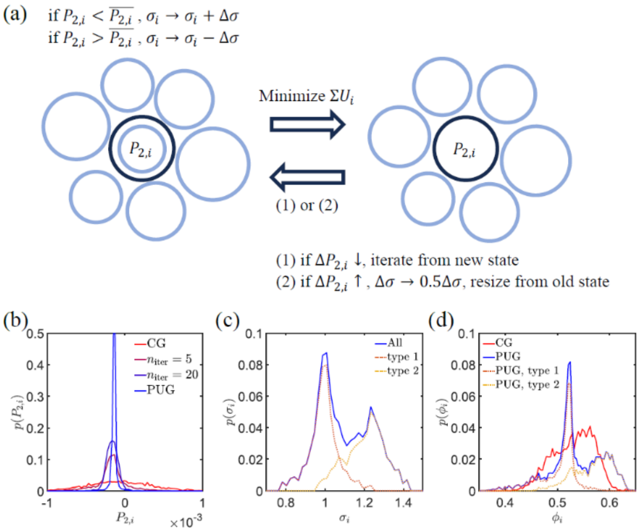


図 1 (a)PUG 作成アルゴリズム。(b)局所圧力の分布。反復ごとに収束していく。(c) PUG 相の粒径分布。(d)局所密度の分布。

【参考文献】

(1) C. Royall, *et al.*, **2023**, arXiv: 2305.02452
(2) E. Sanz *et al.*, **2014**, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 111 (1) 75-80
(3) T. Yanagishima *et al.*, **2021**, *Phys. Rev. Lett.*, 127, 215501
(4) C. Herrero *et al.*, **2023**, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 120, e2220824120

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

数値計算に基づくリバースチルトドメインの構造およびエネルギー評価

(秋田工業高等専門学校) 柳町 拓哉

【はじめに】

サンドイッチ型セル中で水平配向したネマチック液晶に縦方向の電場を加えると，リバースチルトドメイン (RTD)と呼ばれるドメインが生成される．RTD 外縁のドメイン壁には液晶の弾性エネルギーに由来する線張力がはたらき，時間とともに収縮して最終的に消滅する．

印加電圧を大きくするとドメイン壁の線幅は細くなり，構造の変化が見られる．磁場を利用した従来の研究においても，外場の増加に伴ってドメイン壁が線欠陥へと転移(pincement)する様子が偏光顕微鏡により観察された(1)．収縮ダイナミクスに対する pincement の影響を明らかにするためには，構造変化が生じる閾電圧を決定することが必要である．しかし，顕微鏡像のみから定量的な評価を行うことは困難であった．

そこで本研究では数値計算によってドメイン壁の構造とエネルギーを求め，pincement が生じる閾電圧を決定した．また RTD の収縮過程を実験的に観察し，pincement の影響がマクロなダイナミクスにどのように現れるか検討を行った．

【結果と考察】

欠陥を含まないドメイン壁と，欠陥を含むドメイン壁のエネルギーを数値計算により得た．物性定数として代表的な液晶物質である 5CB の 25.0 ˚C における値を用い，セルギャップを 16 μm とした．結果を図 1 に示す．欠陥を含まない場合のエネルギーは 0.6 V と 0.7 V の間で立ち上がりはじめる．これは実験系における Fréedericksz 転移の閾値が 0.67 V であることに対応する．エネルギーは電圧とともに増加し，1.4 V と 1.6 V の間で欠陥を含むドメイン壁のエネルギー曲線と交差する．従って，pincement は 1.4 ~ 1.6 V の範囲で生じることが分かる．

収縮するドメイン壁の曲率半径 *R* を実験的に求め，時間に対してプロットしたものを図 2 に示す．実験には 5CB を使用し，温度 25.0 ˚C，印加電圧を 0.8 ~ 3.0 V_{rms} (AC 1 kHz)とした．電圧の増加とともに曲線の傾きは小さくなり，1.6 V_{rms} 以上で曲線は重なっている．この電圧は数値計算により得られた値と一致しており，pincement による影響をドメイン壁のマクロなダイナミクスから検出できることを示唆している．

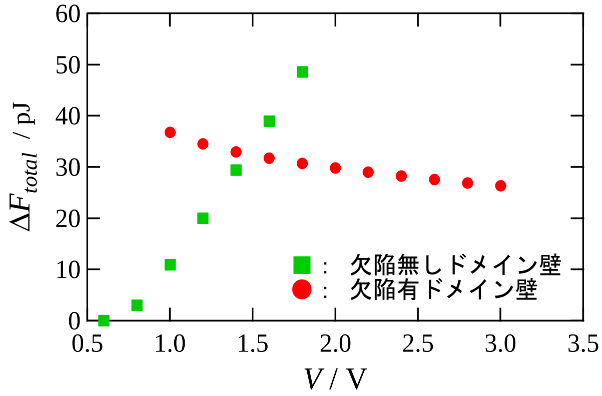


図 1. 計算により求めたドメイン壁のエネルギーΔF_{total}と電圧 *V* の関係.

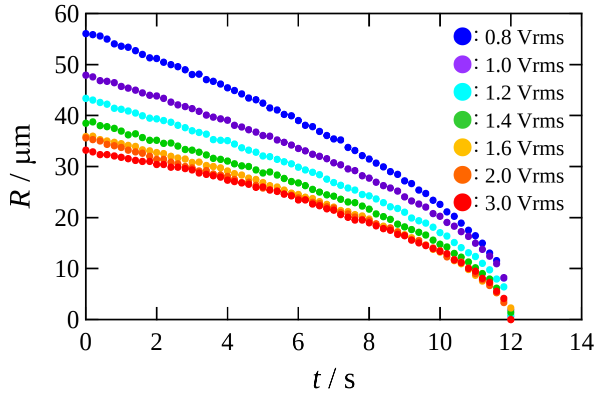


図 2. 曲率半径 *R* の時間依存性.

【参考文献】

(1) de Gennes and Prost, *The Physics of Liquid Crystals, 2nd ed.* (Clarendon Press, Oxford, 1993).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

深層学習によるガラス形成液体の温度変化に伴う構造変化の解明

（阪大基礎工）矢野 健太郎，後藤 頌太，金 鋼，松林 伸幸

【はじめに】

液体を冷却しても結晶化が阻害されると，融点以下の液体状態が維持されガラスになる。ガラス形成液体の構造緩和時間は温度の低下とともに急激に遅くなりガラス転移温度で非晶質構造が凍結する。このガラス転移現象をもたらす何らかの特徴的な静的構造があるかという点については多くの研究がされている。近年，機械学習を用いてガラス形成液体の構造における特徴量を抽出する研究が多数報告されている。注目すべきは，畳み込みニューラルネットワーク(CNN)やグラフニューラルネットワーク(GNN）といった最新の深層学習技術が応用されていることである。例えば，GNN を用いればガラス形成液体の構造と動力学を学習し，従来の機械学習手法より高い性能予測を示すことが報告されている[1, 2]。さらに CNN による画像認識を応用すると，ガラスと液体の構造分類とその分類根拠となる
特徴的構造が抽出されることも報告された[3]。本研究では GNN によって異なる 2 つ温度のガラス形成液体の構造を分類し，更に Self-Attention 機構を組み込むことで分類根拠を獲得することを目指した。また粒子間の局所秩序を特徴づける Bond order parameter (Q_6 およびQ_4)との比較によりガラス形成液体の温度変化に伴う構造変化を説明した。

本研究ではガラス形成液体のモデルとして 3 次元 2 成分 soft-sphere モデル[4]を採用し、分子動力学シミュレーションをおこなった。GNN はグラフを扱うための深層学習手法であり，グラフとは，要素をノード，要素間の関係をエッジとして構成されたデータ構造である。GNN はグラフデータを入力とすることを活かし，入力グラフのノードとエッジの情報の更新を繰り返し，自ら特徴量を作り出すことができる。得られた粒子配置について，粒子をノード，第一配位圏以下の粒子間のつながりをエッジとしてモデル化したグラフ構造を構築した。粒子の種類と粒子間の相対座標をグラフに符号化することで，異なる 2 つの温度の構造分類(二値分類）をおこなった。また、GNN モデルにノード間の関係性を定量化する機構である Self-Attention[5]を導入したことで，GNN モデルの分類根拠を明らかにした。

【結果と考察】

GNN は，ガラス転移温度近傍の構造と温度の高い液体構造の違いを 100 %識別できることを明らかにした。ただし、一方で高温の液体構造同士は識別できないことがわかった。このことは温度の変化にしたがって、ガラスと液体とで微細な構造変化を GNN は学習していることを示唆する。また，Self-Attention により算出された粒子間の重要度について高温では粒子間の重要度にばらつきが見られ，低温になるにつれてその重要度が概ね均一になることがわかった。さらに Self-Attention により抽出された寄与度が高い粒子は，Q_6が小さい傾向にあることを見出した。以上のことから，GNN はガラス形成液体の温度の違いを，Q_6 が小さく局所的に結晶秩序の度合いが小さい粒子を根拠に分類していると考えられる [6]。

【参考文献】

[1] V. Bapst et al., Nat. Phys. 16, 448 (2020).
[2] H. Shiba, et al., J. Chem. Phys. 158, 084503 (2023).
[3] N. Oyama et al., Front. Phys. 10, 1007861 (2023).
[4] B. Bernu, et al., J. Phys. C 18, L371 (1985).
[5] P. Veličković et al., arXiv:1710.10903 (2017).
[6] K. Yano, S. Goto, K. Kim, and N. Matubayasi, in preparation.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

皺の発生に駆動される棒の座屈不安定性

(慶應義塾大学 理工学部 機械工学科)山川健心、佐野友彦

【はじめに】

皺は、不安定性に基づく身近な現象の一つである。脳や皮膚などの組織表面や衣服などで多く見られ、工業的にも盛んに応用されている。皺は柔らかい基盤に貼られた薄膜が圧縮力を受けることで発生する座屈不安定性である。(1)皺に関する研究は板やシェル上で多く行われているが、ロッドやチューブなどの棒状構造物ではこの限りではない。そこで本研究では、シリコーンでできた細長い丸棒表面に皺を発生させることにより、棒がどのような挙動を示すかを調べた。

【結果と考察】

本研究では、pre-stretchした棒に対してDip-coating法(2)を用いて棒表面上にシリコーン性の膜を形成し、シリコーン硬化後にpre-stretchを解放することによって発生する圧縮力により皺を形成した。コーティング速度Uを変えることで表面膜の厚みを変化させることができ、pre-stretchの引っ張り長さΔLを変えると膜に発生する圧縮力を変えることができる。様々な両パラメータに対して実験を行ったところ、棒の形状は平面的な2次元変形と立体的なカール形状を示す3次元変形の2種類が見られた。pre-stretchが強くコーティング圧が分厚い場合は棒がらせんを巻いた3次元的な変形となる(図(f))。このような2,3次元状の座屈形態の変化は、自発曲率をもつ弾性棒を重力下に垂らした際にもみられ類似していると考察できる(3)。pre-stretchやコーティング圧が分厚いと棒に外力を加えていない状態での曲率が大きくなる。このため、実効的な自発曲率が大きくなったとみなすことができる。相図(図(f))において2,3次元の座屈状態が変化する相境界はこのような議論で説明できることが期待できる。

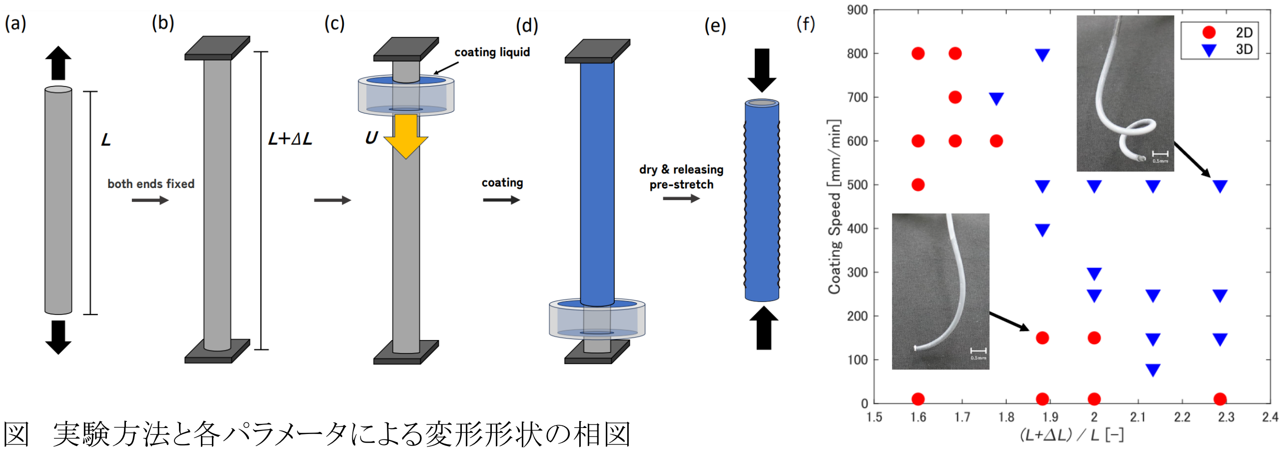


図　実験方法と各パラメータによる変形形状の相図
実験方法:(a,b)長さLの棒をΔL引っ張った状態で両端を固定。(c, d)コーティング液の入った液溜めを棒に取り付け、コーティング速度Uで棒表面をコーティング。(e)乾燥、pre-stretchを解放することで圧縮力が働き、変形が発生。
相図:(f)横軸に無次元化した引っ張り長さ、縦軸にコーティング速度をとり、2次元変形を●、3次元変形を▲として相図を得た。

【参考文献】

(1) Yang, S., Khare, K., & Lin, P. C. (2010). Harnessing surface wrinkle patterns in soft matter. Advanced Functional Materials, 20(16), 2550–2564.
(2) Landau, L., & Levich, B. (1988). Dragging of a Liquid by a Moving Plate. In Dynamics of Curved Fronts (pp. 141–153). Elsevier.
(3) Miller, J. T., Lazarus, A., Audoly, B., & Reis, P. M. (2014). Shapes of a suspended curly hair. Physical Review Letters, 112(6).

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

細胞形態テンソルを用いた細胞組織の相分離モデル

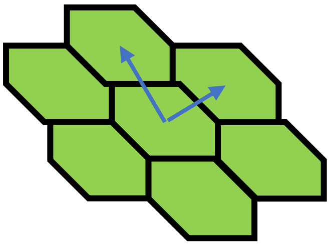
Fumiya Yamawaki[1*] and Jun-ichi Fukuda[1]
[1]Department of Physics, Kyushu University, Fukuoka, Japan

私たち人間のような多細胞生物の体を形成する細胞は、その発生過程で「細胞選別」と呼ばれる過程を経る。例えば、2 つの異なる種類の細胞を混合して培養すると、同じ種類の細胞が集まり、相分離が起こることが知られている。

細胞の相分離を調べるための理論的研究が行われ、そのダイナミクスは流体系のものとして扱われることが多い（例えば、Hohenberg と Halperin の命名法ではモデル H）。しかし、表皮組織のように形状を維持する細胞を含む組織を、単純な流体系とみなして妥当かどうかは明らかではない。また、細胞の形状（ミクロ）と組織の挙動（マクロ）の関係を明らかにするための実験技術やデータ解析技術は開発されているが、その根底にあるメカニズムの理解はまだ不十分である。

本研究の目的は、細胞の形状が細胞選別と細胞相分離における組織の挙動にどのように影響するかを明らかにすることである。ここでは、細胞組織の解析に使われ、細胞の変形を扱うことができる細胞形態テンソル[1]と呼ばれる流体力学的変数を細胞相分離モデルに組み込むことを検討する。これは、変形可能な細胞が接着して組織を形成する表現に適しており、細胞の形状と密度に関する情報を含んでいる。発表では、シミュレーション結果と考察について詳しく述べる。

Figure 1: 細胞形態テンソル



References

[1] S. Ishihara et al., Phys. Rev. E **96**, 022418 (2017)

* Correspondence: yamawaki.fumiya.694@s.kyushu-u.ac.jp

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

ハイドロゲルのすべり摩擦におけるサイズ効果

（東大院農学生命）山口　哲生

【はじめに】

ハイドロゲルを基板の上ですべらせると，しばしば低摩擦を示す．ハイドロゲルの低摩擦メカニズムとして，①高分子鎖中の電荷に起因するゲルの膨潤および静的潤滑膜形成 [1)]，②溶液中に含まれるタンパク質や脂質の吸着による表面保護膜および弱せん断層形成 [2)]，③固液２相性潤滑（応力 - 拡散結合）の効果による内部流体圧の発生や固体成分の荷重負荷能力の低減 [3,4)]などが提案されているが，通常の摩擦では複数のメカニズムが同時に働くためメカニズムの検証は容易ではない．そこで本研究では，固液２相性潤滑の効果（③）のみに着目し，人工軟骨材料として検討されている反復凍結 PVA ゲル（中性ハイドロゲル）を，図１のように純水中で摩擦させる実験を行なった [5)].

【結果と考察】

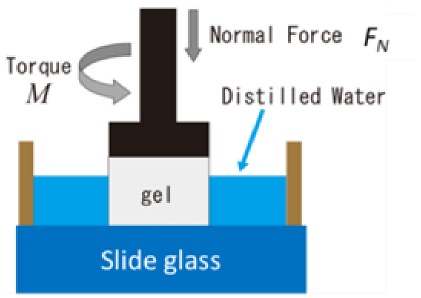


図１： 摩擦実験の概略図

実験結果の典型例として，図 2 に様々な半径や厚みを持つゲルにおける摩擦係数の時間発展を示した．図２(a)では，試料の半径の違いによらず，共通した傾向が伺える：摩擦係数は約 0.08 からスタートし，時間とともに増大し，ある一定値(～0.13)に漸近する．一方，半径によって摩擦係数増加の緩和時間は変化した．また，図２(b)には,摩擦係数の試料厚み依存性を示した．ここから，試料を薄くするだけで摩擦係数が大きく低下することが分かる．ここで注意したいのは，この実験において，ゲルの組成や摩擦表面の性状など，通常摩擦に関与すると考えられる因子は一切変更していないということである．つまり，今回の結果は，ゲルの摩擦係数は表面の特性だけからは決まらず，試料の形状にも強く依存することを示唆している．当日は，応力-拡散結合モデルを用いた現象の記述についても説明を行う予定である．

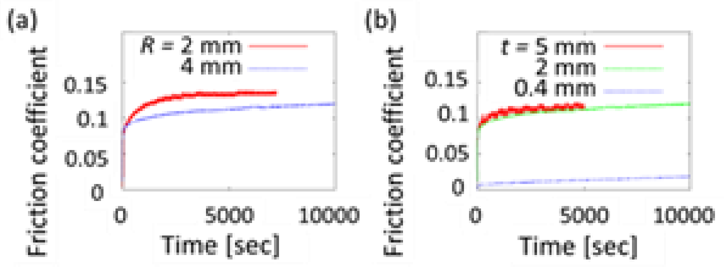


図 2: PVA ハイドロゲルにおける摩擦係数の時間変化．(a)試料半径依存性，(b)試料厚み依存性．

【参考文献】

(1) J. P. Gong, Soft Matter **2**, 544-552 (2006).
(2) S. Yarimitsu, K. Nakashima, Y. Sawae, T. Murakami, Tribo. Int. **42**, 1615-1623 (2009).
(3) V. C. Mow, A. Ratcliffe, S.L-Y. Woo, eds., “Biomechanics of Diarthrodial Joints”, Vol. 1, Springer-Verlag (1990).
(4) N. Sakai, Y. Hagihara, T. Furusawa, N. Hosoda, Y. Sawae, T. Murakami, Trib. Int. **46**, 225-236 (2012).
(5) T. Yamaguchi, Y. Sawae, T. Murakami, submitted.

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

キネティックサンドの加振応答性

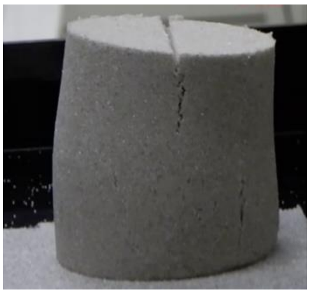
東京都立大学大学院　横田瑶，谷茉莉，栗田玲

【はじめに】

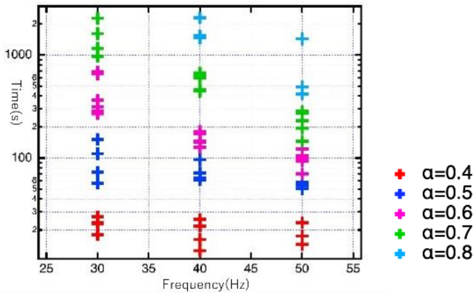
粉粒体は、道路や建築物で使われるだけでなく、地滑りや粉塵などさまざまな現象に関係しているため、古くから研究されている。乾いた粉粒体の研究は盛んに行われている一方で、濡れた粉粒体の研究は水分量の空間不均一性があるなど、実験的困難さがあり、あまり研究が進んでいない。近年、シリコンオイルコーティングされた砂であるキネティックサンドが開発されており、これは粒子間で相互作用を安定的に保つ砂である。キネティックサンドを濡れた粉体のモデル系として期待し、相互作用の空間不均一性を意識したキネティックサンドと普通の砂による混合系の性質を調べてきた。キネティックサンドの質量混合比αが 0.2 を超えると、キネティックサンドによる相互作用ネットワークが全体に行き渡るようになり、自重耐久性が増す(1)。さらに、混合比αが 0.6 以上になると、試料の強度がさらに急激に増加することがわかった(2)。静的な性質についてはは解明されたことも多いが、動的な性質についてまだ調べられていない。そこで、試料の耐久性の更なる解明を目指し、加振実験を行った。

【結果と考察】

円筒型の容器に混合系の試料をランダムに最密充填し、容器から取り出した後に予備亀裂を入れた。崩壊過程を見るために、周波数、振幅を制御パラメータとして加振した。加振開始後、しばらくたつと試料の亀裂が急速に進展する。試料の混合比αが大きいほど亀裂進展の開始時間が遅く、 進展速度も小さかった。また、加振加速度が大きいほど、亀裂進展の開始時間が早くなっていることもわかった。発表では、混合比αによる加振応答のふるまいから試料の耐久性を比較した結果を報告する。



亀裂進展の様子(キネティックサンド 70%)



混合比αごとの亀裂幅が 2.4mm に達する時間

【参考文献】

(1) M. Tani, H. Fujio, and R. Kurita. Journal of the Physical Society of Japan. 90, 033801(2021).

(2) H. Fujio, H. Yokota, M. Tani, and R. Kurita. revised.

 Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

変形可能自己駆動粒子系における動的不均一性

吉井 究[1]，Duc Dam T.[1]，斉藤 稔[2]，宮崎 州正[1]，川﨑 猛史[1]
(名古屋大学大学院理学研究科[1]，広島大学大学院統合生命科学研究科[2])

【はじめに】

がんはこの 40 年間日本人の死因の約 25%を占める．がんにおける死因の主な要因は「がん転移」である．その為，この転移のメカニズムの理解は，がんの治療法の開発・研究において重要な課題の一つである．近年のがん研究では，がん細胞の集団的な挙動が，転移のメカニズムの解明において重要であると示唆されている．更に，その集団挙動をガラス転移等の物理的側面からの理解が試みられている[1]．特に注目すべきは，実際のがん細胞の運動において，ガラス系で広く観測される動的不均一性が観測される点である [2]．加えて，この動的不均一性の活性化領域が大きいほど，将来がんが転移する可能性が高くなると報告されている．このように，がん細胞の動的不均一性と転移の関係を明らかにすることは重要である．そこで本研究では，細胞の物理モデルを用いて上記の関係の解明を目指す．これまでの細胞の物理モデルでは，空間全体を分割し，その分割領域一つ一つを細胞とみなした研究が主流であった[3]．しかし，このような空間分割モデルでは，細胞は隙間のない多角形で近似され，充填率は 1 で固定されている．そのため，ガラス転移において重要なパラメタである粒子密度や，局所的な隙間（自由体積）の影響などを考慮することが出来ない．本研究では変形可能な粒子モデルを採用し，密度や空隙，細胞粒子の変形・形状が動的不均一性に与える影響を明らかにする．

【モデルと結果】

本研究では，斉藤と石原によって提案された変形可能な粒子モデル[4]を用いて，自己駆動粒子の数値シミュレーションを行った．密度が 1 に近い系において，粒子のアクティビティー，硬さを変化させると，固体相，固体流体共存相，流体相が発現することが報告されている[4]．特に，この流体相において，図 1 に示すような，運動の速い領域と遅い領域とが共存した不均一な粒子の移動が確認された．発表では，モデル細胞系での動的不均一性の諸性質（粒子密度や粒子の柔らかさ，そして粒子のアクティビティーを広く変えた際の振る舞い）について調べた結果について報告する．

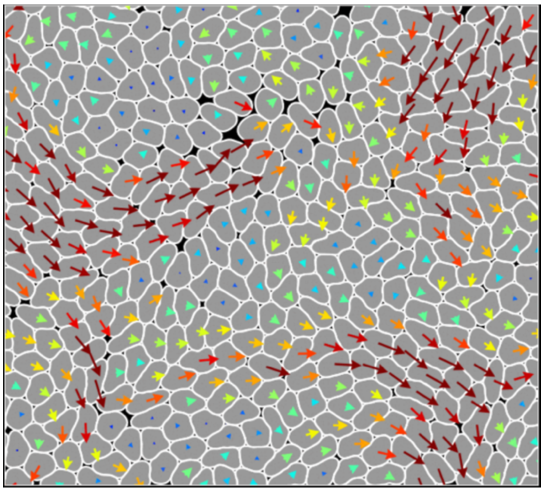


図 1.変形可能な粒子の数値シミュレーションのスナップショット．矢印の色及び大きさは変位の大きさ，矢印の向きは変位ベクトルの向きに各々対応する．

【参考文献】

(1) L. Oswald, et al., J. Phys. D, 50: 483001 (2017).
(2) P. Gottheil, et al., Phys. Rev. X 13, 031003 (2023).
(3) D. Bi, et al., Phys. Rev. X 6, 021011 (2016).
(4) N. Saito & S. Ishihara, arXiv:2303.03580

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

アクティブガラスの構造揺らぎ

（東大総合文化）吉田真樹，水野英如，池田昌司

【はじめに】

自らエネルギーを生み出して運動や変形を行う物質の集団は「アクティブマター」と総称される。世の中に存在する多種多様なアクティブマターは、密度を上げていくと急激に運動が遅くなり、ついにはランダムな配置のまま固まって動かなくなるという共通した現象を見せる[1]。このようにして得られた固体を「アクティブガラス」と呼ぶ。熱的な系のガラスについては、近年、その固体物性がホットトピックとなり、弾性や振動特性の異常性の理解が進んだ[2][3]。アクティブガラスは構成要素のアクティブネスによりさらに特異な振動特性を持つことが期待されるが、その理解はほとんど進んでいない。

【結果と考察】

本研究では、アクティブモデル粒子である Active Ornstein Uhlenbeck Particles（AOUP）、Active Brownian Particles（ABP）、Run and Tumble Particles（RTP）を用いて、３種類のアクティブガラスを作成し、アクティブガラスの振動モードの励起を調べた。特に ABP や RTP は現実のアクティブマターに近いモデルとなっている。我々は初めに Harmonic 近似のもとで AOUP ガラスの運動方程式を解析的に解いた。その結果、AOUP ガラスでは AOUP ノイズの持続時間 τ に依存する特徴的な周波数 $\omega^*(\tau)$ が存在し、$\omega^*(\tau)$ よりも高周波の振動モードの励起が強く抑制されることが明らかになった（図１）。これは、全ての振動モードがエネルギー等分配則に従って励起する熱的なガラスとは大きく異なる振動特性である。また ABP や RTP はノイズが非ガウス的であるという AOUP とは大きく異なる性質を持ちながらも、ABP ガラスや RTP ガラスの振動モードの励起が AOUP ガラスの振動モードの励起と確率分布のレベルで一致することを明らかにした。

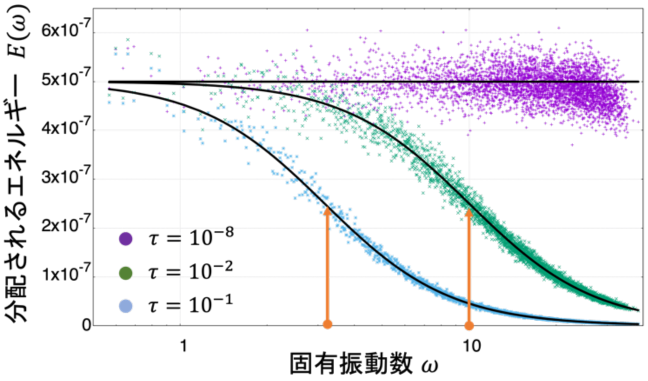


図 1：AOUP ガラスの各固有振動モードに分配されるエネルギー（点はシミュレーション、黒実線は解析的な計算によって得られたデータ。橙矢印は特徴的な周波数 $\omega^*(\tau)$。）

【参考文献】

[1] Liesbeth M. C. Janssen , J. Phys. Condens. Matter 31, 503002 (2019)
[2] Hideyuki Mizuno *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 114, E9767 (2016)
[3] Hideyuki Mizuno *et al.*, J. Chem. Phys. 153, 154501 (2020)

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Distinct elastic properties and their origins in glasses and gels

(University of Tokyo) Yinqiao Wang

[Introduction]

Glasses and gels, widely encountered amorphous solids with diverse industrial and everyday applications, share intriguing similarities such as rigidity without crystalline order and dynamic slowing down during aging. However, the underlying differences between these two fascinating materials have remained elusive.

[Results and Discussion]

Here we uncover distinct elastic properties concerning observation and aging times in glasses and gels, while delving into the underlying mechanisms. In glasses, we observe a gradual decrease in the shear modulus, while the bulk modulus remains constant throughout the observation time. In contrast, gels exhibit a decrease in both the shear and bulk moduli over the observation time. Additionally, during aging, glasses exhibit a steady trend of stiffening, while gels demonstrate initial stiffening followed by softening. By unravelling the intricate relationship between structure, dynamics, and elasticity, we attribute these differences to mechanisms that minimize free energy: structural ordering in glasses and interface reduction in gels. Our work not only uncovers the distinct behaviors of glasses and gels but also sheds light on the origin and evolution of elasticity in non-equilibrium disordered solids, offering significant implications for the application and design of amorphous materials.

[References]

(1) https://arxiv.org/abs/2308.04250

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.

Condensate-membrane wetting and capillary forces in cells

Roland L. Knorr
(Interfacial Cell Biology Lab, Humboldt-Universität zu Berlin, Germany
Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Japan
Graduate School and Faculty of Medicine, The University of Tokyo, Japan)

Membrane-bound organelles have long been considered solely responsible for intracellular compartmentalization, but more recent work has demonstrated that condensates also organise the interior of the cell. Forming from localised, liquid-like concentrations of biomolecules condensates are often described as 'membrane-less organelles' due to their lack of a bounding membrane. Our recent research has shown that these compartments can in fact wet membrane-bound compartments, resulting in remarkable condensate-membrane morphologies, the physiological importance of which is only just becoming apparent [1].

Evidence suggests that condensate clearance involves autophagy, a highly-conserved cellular recycling system in which membrane sheets expand, bend to isolate and degrade portions of the cell interior. Here, we investigate the mechanisms of condensate sequestration by membrane sheets in both living and synthetic cells. A minimal theoretical model shows that capillary forces determine whether membrane sheets isolate condensates in a whole or piecemeal fashion [2]. Further, we also find that wetting condensates induce local changes in membrane properties, resulting in the reversal of the bending direction of membrane sheets and, thus, in cytosol sequestration. Our identification of condensates as potential autophagosomal assembly platforms is consistent with our additional study reporting that the pre-autophagosomal structure is a condensate containing various autophagy-related proteins [3]. Further, we demonstrate that the morphogenesis of protein storage vacuoles in plants underlies similar physical principles [4]. I propose that condensate-mediated autophagy and vacuole remodelling represent a novel class of cellular processes controlled by capillary forces.

[1] Kusumaatmaja H, May AI, Knorr RL. Intracellular wetting mediates contacts between liquid compartments and membrane-bound organelles. Journal of Cell Biology. 220(10):e202103175. doi:10.1083/jcb.202103175
[2] Agudo-Canalejo J, Schultz SW, et al., Knorr RL. Wetting regulates autophagy of phase-separated compartments and the cytosol. Nature. 2021;591(7848):142-146. doi:10.1038/s41586-020-2992-3
[3] Fujioka Y, Alam JM, Noshiro D, et al. Phase separation organizes the site of autophagosome formation. Nature. 2020;578(7794):301-305. doi:10.1038/s41586-020-1977-6
[4] Kusumaatmaja H, May AI, Feeney M, et al., Knorr RL. Wetting of phase-separated droplets on plant vacuole membranes leads to a competition between tonoplast budding and nanotube formation. PNAS. 2021;118(36):e2024109118. doi:10.1073/pnas.2024109118

Copyright(C) ソフトマター研究会事務局 All right reserved.