

Mechanical deformation induced modulation of biochemical functions of microtubules

Tanjina Afrin,¹ Arif Md. Rashedul Kabir,² Kazuki Sada,^{1,2} and Akira Kakugo^{1,2}

(¹Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University;

²Faculty of Science, Hokkaido University)

【Introduction】 Microtubule (MT), the most rigid component of cytoskeleton, plays important roles in many cellular processes such as cell shape regulation, cell division, intracellular transportation, etc.¹ The mechanical properties of MTs, which are inevitably important for maintaining MT's functions in cells, have widely been studied in order to understand the involvement of MTs in the cellular events. Recently MTs have been drawing much attention for their responsiveness to mechanical stress. It is suspected that mechanical stress modulates the biochemical functions of MTs although any solid evidence is lacking yet. In this work we systematically investigate the mechanoresponsiveness of MTs and functionality of the mechanically deformed MTs in an *in vitro* condition. We found that despite their superior mechanical integrity, MTs undergo mechanical deformation when subjected to mechanical stress.² The mechanical deformation of MTs is found to significantly modulate their biochemical functions. This work may offers a new insight in the mechanoregulation of cellular activities related to the cytoskeletal component.

【Results and Discussion】 To investigate the mechano-responsiveness of MTs in an *in vitro* condition we recently developed an experimental set up named mechanical chamber. By using this device we investigated the effect of tensile and compression stress on the MTs. Under compression or tensile stress MTs underwent buckling and fragmentation respectively. Next we addressed how the response of MTs to mechanical stress consequently enables the MTs to modulate their functions for which we focused on the motor protein based transportation along MTs, which is one of the important physiological functions of MTs. By monitoring kinesin driven transportation of Quantum dot (Q-dot) as cargo along buckled MTs (Figure 1) we unveil the effect of compression stress on the dynamics of transportation by a motor protein. The cargo transportation was hindered due to the MT buckling which was found tightly correlated to the extent of MT deformation. More importantly, the affinity between kinesins and MTs was found to increase due to the buckling of the MTs, which clearly figures out how the responsiveness of MTs to mechanical stress allows them to work as mechanosensors. This work would help understand the role of MTs as mechanosensor in regulating the cellular mechanotransduction process.

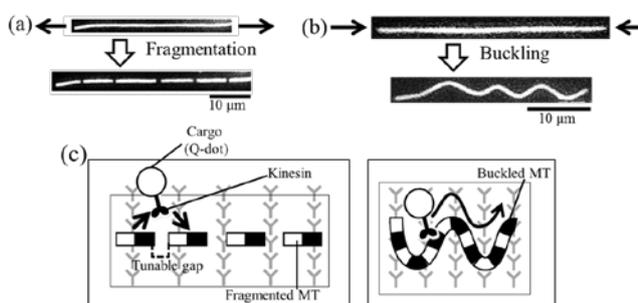


Figure 1: Mechanical deformation of microtubules under tensile (a), and compression stress (b). Schematic illustration showing experimental design for investigating the motor protein driven cargo transportation along mechanically deformed MTs.

【References】

- (1) Wang, N., et. al., *Science*, 260, 1124, (1993).
- (2) Kabir, A. M. R. et al., *Sci. Rep.*, 5, 17222, DOI: 10.1038/srep17222 (2015)
- (3) Tanjina Afrin et al., *BBRC*, DOI: 10.1016/j.bbrc.2016.09.133

Dynamic behavior of swarm microtubules driven by kinesins

Arif Md. Rashedul Kabir¹, Tamanna Ishrat Farhana², Daisuke Inoue¹,
Kazuki Sada^{1,2}, and Akira Kakugo^{1,2}

(¹Faculty of Science, Hokkaido University; ²Graduate School of Chemical Sciences and
Engineering, Hokkaido University)

【Introduction】

Collective motion is a fascinating example of coordinated behavior of self-propelled objects, which is often associated with the formation of large scale patterns. Nowadays, in vitro gliding assay is being considered a model system to experimentally investigate various aspects of group behavior and pattern formation by self-propelled objects. In this work, we have demonstrated the collective motion of kinesin driven microtubules by regulating mutual interaction among the gliding microtubules, by employing depletion force among them.¹ Proper regulation of the mutual interaction among the gliding microtubules through employment of the depletion force was found to allow the exhibition of collective motion and stream pattern formation by microtubules. We also discuss how collectively moving microtubule on kinesin coated elastomer substrate response to external stimuli such as mechanical stresses.

【Results and Discussion】

By employing a macromolecule (methylcellulose) induced depletion force, we demonstrated the first-ever collective motion and stream pattern formation by microtubules on a kinesin coated surface. This method offers a simple and universal technique to investigate the coordinated behavior of self-propelled objects using biomolecular motor systems. Consequently, this will be helpful in understanding not only the collective behavior of self-propelled objects such as birds, animals or fishes, but also may provide new insight into emergent structures obtained through a non-equilibrium process. Recently microtubule/kinesin system has attracted attention in the field of molecular robotics as the smallest self-propelled objects. Molecular robots, relying on a large number of collectively moving self-propelled objects such as gliding microtubules, enables parallel processing in transporting a large number of small cargos and assembling building blocks into an ordered structure. Therefore, ideas obtained from the present study on collective motion of gliding microtubules are expected to expand the boundaries in the field of molecular robotics.

【References】

(1) Inoue et. al., *Nanoscale*, 7, 18054-18061, (2015).

細胞骨格構造の *in vitro* 再構成

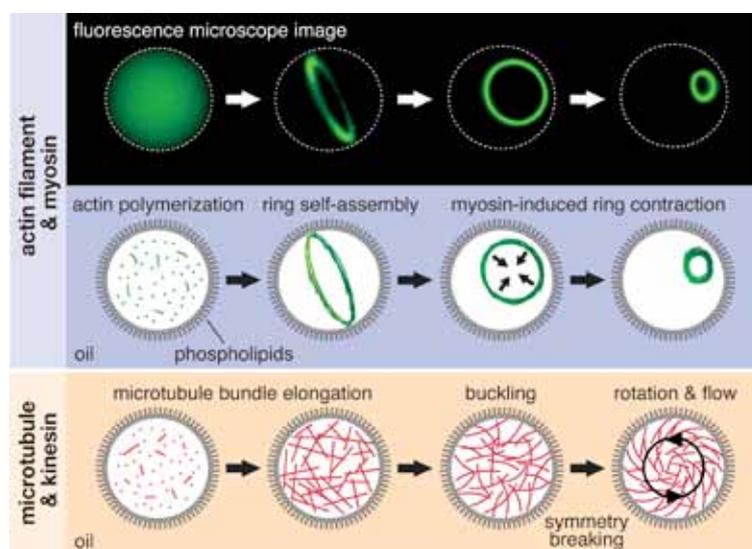
(早大・物理) 宮崎 牧人

【はじめに】

動物細胞には細胞骨格と呼ばれる、主に極性フィラメントと分子モーターから構成されるネットワーク構造がある。極性フィラメントにはアクチン繊維と微小管の2種類が存在し、それぞれミオシンとキネシン・ダイニンと呼ばれる分子モーターが働いている。細胞は、様々な形態の細胞骨格を自在に組み替えることで細胞内の物質輸送、細胞運動、細胞分裂などの多様な機能を制御していると考えられているが、その仕組みは未だに良く分かっていない。

【結果と考察】

我々は、精製タンパク質及び細胞質抽出液を細胞サイズの液滴(1)及びリポソーム(2)に封入した人工細胞システムを構築し、タンパク質の組成と活性度、閉鎖空間の大きさが、自己組織的に形成されるネットワーク構造と、その動態に及ぼす効果を調べている。本公演では主に a)細胞分裂装置の形成機構、b)微小管-キネシン駆動の細胞質流動の発生機構、について紹介する。



- a) 細胞サイズの球状液滴内にアクチンとミオシン、アクチンの束化因子を封入したところ、赤道面にリングが形成され、ミオシンの濃度依存的に収縮した。細胞と比べて圧倒的に単純な系にも関わらず、細胞分裂装置である収縮環の基本的性質を再現したことから、収縮環形成における閉鎖空間の物理的寄与が示唆された(3)。
- b) 細胞質抽出液を液滴に封入し微小管の重合を促すと、微小管がランダムに配向したネットワーク構造が形成された。ダイニンが活性化されている場合にはネットワークの収縮が生じたが、ダイニンが阻害されている場合には、伸張性の微小管バンドルが液滴内壁に到達し、ネットワークを回転させる力が生じるようになった。次第にネットワークが螺旋状に配向しながら回転するとともに、細胞質の回転流動が発生した(4)。

【参考文献】

- (1) M. Miyazaki, M. Chiba, S. Ishiwata, *Protoc. Exch.* doi: 10.1038/protex.2015.029 (2015).
- (2) M. Chiba, M. Miyazaki, S. Ishiwata, *Biophys. J.* **107**, 346-354 (2014).
- (3) M. Miyazaki, M. Chiba, H. Eguchi, T. Ohki, S. Ishiwata, *Nat. Cell Biol.* **17**, 480-489 (2015).
- (4) K. Suzuki, M. Miyazaki, J. Takagi, T. Itabashi, S. Ishiwata, *submitted*.

三次元再生組織の形態形成動力学

(北海道大学・先端生命科学研究院) 古澤和也, 土田雅之, 八幡早紀

【はじめに】

我々の体を作る組織や臓器は細胞と細胞外基質の組み合わせでできている。組織や臓器の形態形成過程は、細胞や細胞集団の運動、細胞による細胞外基質の分泌や分解そして変形などの動的な振る舞いによって進行する。各組織の形づくりの過程は極めて再現性が高いが、その理由についてはまだわからないことが多く残されている。組織を構築するために必要最小限の種類の細胞を共培養することで、各組織や臓器の形態形成過程を再現する取り組みが近年盛んに進められている^{1,2}。このことによって生き物の形づくりのメカニズムを必要最小限の因子の組み合わせで説明できないか検証することが狙いの一つである。この方法を用いた研究の多くは、プラスチックディッシュ上などの二次元基盤の上で研究が進められている。しかしながら、生き物の形づくりは実際には三次元環境で進行するものである。さらには細胞だけでなく細胞外基質の存在下で生き物の形づくりは進行する。それゆえ、細胞と細胞足場素材の組み合わせでできた三次元再生組織は、生き物形づくりのメカニズムを解明するうえで有用なモデルシステムと成り得る。そこで本研究では、細胞と構造の異なるコラーゲンゲルの組み合わせでできた三次元再生組織の形態形成過程を追跡することで、生き物の形づくりの高い再現性の謎を解き明かすための手がかりを得ることに挑戦した。

【結果と考察】

肝星細胞を、多管構造（相分離構造）を持つコラーゲンゲル（MCCG³）と均一なコラーゲンゲル（Col）にそれぞれ埋め込むことで細胞外基質の構造のことなる三次元再生組織を構築した。Figure 1 に示されるように、三次元再生組織を培養すると組織の大きさが指数関数的に収縮し、最終的な組織の収縮度合いがコラーゲンゲルの構造によって有意に異なることが示されている。このことは、三次元組織の形態形成が細胞外基質の階層構造によって異なる挙動を示すことを示唆している。また、組織切片のヘマトキシリン-エオシン染色の結果、MCCG に包埋することで調製した試料の中心部ではコラーゲンゲル基質の領域が辺縁部よりも少ないことや、中心部領域に細胞が集中していることが分かった。このような細胞外基質成分の不均一や、細胞の分布の違いが組織の収縮挙動に違いを生むことが示唆された。

【参考文献】

1. Takebe et al., *Cell Stem Cell*, **16**, **2015**, 556-565
2. Sasai et al., *Development*, **139**, **2012**, 4111-4121
3. Furusawa et al., *Biomacromolecules*, **13**, **2012**, 29-39

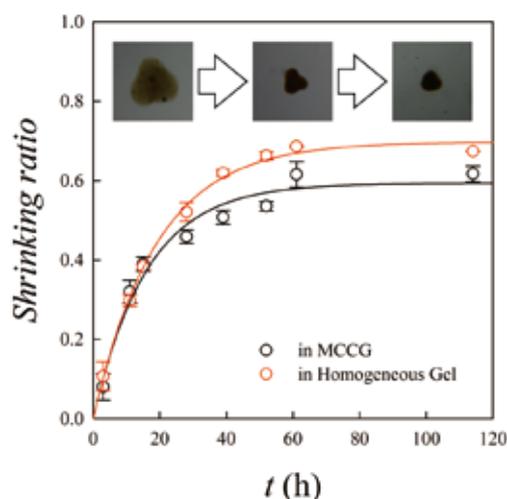
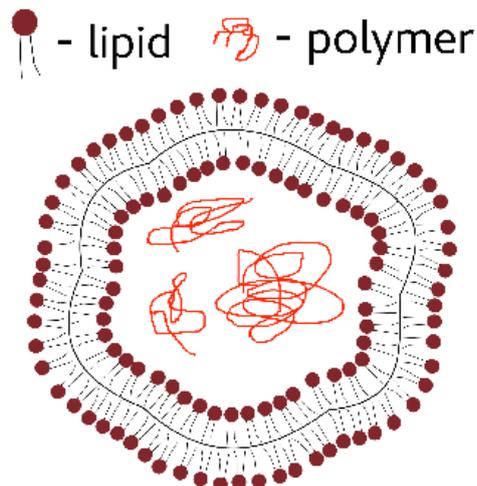


Figure 1. 三次元再生組織の収縮過程。細胞足場素材の構造の違いによって組織の度合いが有意に異なる。

Relaxation dynamics of a vesicle containing highly viscous fluid

(Tokyo Metropolitan University) T. V. Sachin Krishnan, S. Komura, R. Okamoto
(Indian Institute of Technology Madras) P. B. Sunil Kumar

For biological membrane bound compartments, the internal environments could be vastly different from the external [1]. Assuming that these environments are made of simple fluids of different viscosities, we discuss the relaxation dynamics of a compressible bilayer vesicle. We analyse the stability of a free-energy model [2] which includes a coupling between the membrane curvature and the local density difference between the two monolayers. The linear stability analysis reveals two new types of instabilities (i) a large wavelength instability and (ii) a smaller wavelength instability depending on the coupling parameter. Considering two important dissipation sources, the inter-monolayer friction and the bulk fluid viscosity, we solve the coupled hydrodynamic equations both for the bilayer membrane and the surrounding bulk fluid in order to derive the dynamical equations for the vesicle. We find that the three relaxation modes are coupled to each other due to the bilayer architecture. The difference in bulk viscosity between the inner and outer fluid medium alters the coupled relaxation rates by shifting the mode crossing point. As the vesicle approach toward the unstable regions, the relaxation dynamics is dramatically slows down, and the mode structure changes significantly.



References

- [1] R. J. Ellis and A. P. Minton, *Nature* **425**, 27 (2003).
- [2] L. Miao, M. A. Lomholt, and J. Kleis, *Eur. Phys. J. E* **9**, 143 (2002).

高分子のからみあいダイナミクスの多体モデル

(名大 NCC) 増淵雄一

【緒言】

からみあった高分子の運動の記述はいわゆる管模型が成功しているが、扱える系にはモデル状の制約がある[1,2]. 管模型とは高分子間のからみあいの効果を管状の動的な束縛として表現するモデルで、複雑な多体問題を管内でブラウン運動する高分子鎖1本の問題に置き換える. 管模型に全長揺らぎや束縛解放などのダイナミクスを追加した拡張模型群はからみあった高分子の運動をおおむね再現する. しかし系の単純化、特に多体問題を1本鎖問題にしたために、分子間相互作用や分子運動の相関を扱うことはできない.

一方、計算技術の発展により分子シミュレーションも活用の幅を広げているが、高分子への適用は未だ困難がある. 高分子の運動の時間スケールは温度や分子量によるが数秒から数千秒あるいはそれ以上にも及ぶ. これは分子シミュレーションで通常議論されるナノ秒に比べてあまりにも長い.

本研究では高分子の多体運動を扱いながらも高速な計算手法を開発している.

【モデル】

今までに2つのモデルを提案してきている.

一つは Primitive Chain Network(PCN)モデル[3]と呼ばれるもので、高分子液体中のからみあい点の運動だけに注目したモデルである. Kremer-Grest のバネ-ビーズ模型 (KG) によるシミュレーションに対して数万倍以上の計算効率でからみあった高分子の運動を計算できる. また多数の分子の運動を同時に解くため、多様な構造を持つ分子の混ぜ物を解くことができる. しかし注目している系の自由度が“からみあい点”であるため、異なる化学的構造をもつ物質間の相互作用の取り扱いに難がある.

もう一つのモデルは Multi-Chain Slip-Spring(MCSS)モデル[4]と呼ばれるもので、Rouse 鎖の記述からスタートしてからみあいの効果を仮想バネで表したものである. このモデルは PCN に比べると 100 倍程度遅いが、それでも KG よりは数百倍速い. また系の自由エネルギーが定義されるので相互作用の取り入れは容易である. DPD 法との相性もよい[5].

【参考文献】

- [1] Y. Masubuchi, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.*, 5, 11–33 (2014).
- [2] Y. Masubuchi, *Molecular Modeling for Polymer Rheology*, in: Ref. Modul. Mater. Sci. Mater. Eng., Elsevier, (2016), pp. 1–7.
- [3] Y. Masubuchi, J.-I. Takimoto, K. Koyama, G. Ianniruberto, G. Marrucci, and F. Greco, *J. Chem. Phys.*, 115, 4387 (2001).
- [4] T. Uneyama and Y. Masubuchi, *J. Chem. Phys.*, 137, 154902 (2012).
- [5] M. Langeloth, Y. Masubuchi, M.C. Böhm, and F. Müller-plathe, *J. Chem. Phys.*, 138, 104907 (2013).

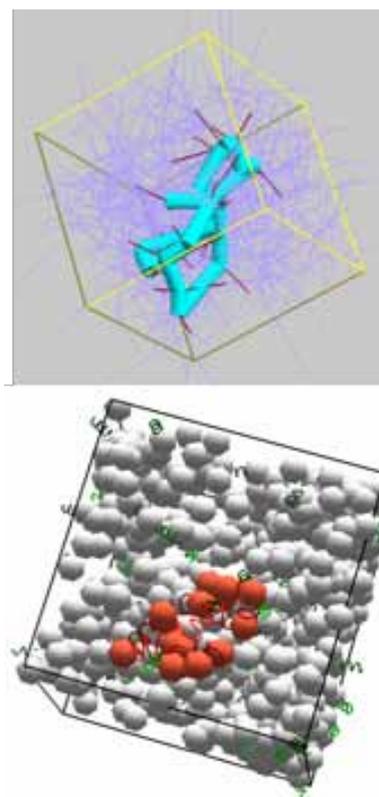


Fig. 1 Snapshot for PCN (top) and MCSS(bottom)

細胞内部の混み合いガラス状態と非熱的な力学駆動

(九大物理) 西澤賢治 水野大介

【はじめに】

細胞内は、様々なタンパク質、RNA 等からなる高濃度の高分子コロイドで満たされており、その上モータータンパク質の非熱的な力により駆動されて、原形質流動や巨大な揺らぎが生成されている。多くの高分子コロイドは凝縮させることでガラス化すること、また力学外場に対して非線形に応答することが知られている。生きた細胞内では、多成分の高分子コロイドの複雑な混み合い状態と自発的な力駆動が混在するが、こうした非平衡凝縮系の力学環境が決定される物理メカニズムは殆ど分かっていない。そこで本研究では、生細胞内部の力学特性に対する高分子混み合い効果の影響を、物理的に理解することを目的とした実験的研究を遂行した。具体的には、代謝活性が除去された平衡状態の細胞抽出液を用いてマイクロレオロジー計測を行い、高分子混み合いに伴う力学特性の変化を定量的に計測した。さらにその結果を生細胞内部のマイクロレオロジー計測（培養液の浸透圧を変化させることで細胞内部濃度を変化させながら）と比較することで、力学的非平衡下での高分子混み合い効果が細胞内部の力学特性へ与える影響の究明を試みた。

【結果と考察】

まず、3種類の細胞抽出液（原核細胞である大腸菌、真核細胞である HeLa 細胞とカエルの卵）の粘性率を、高分子濃度を変化させながらマイクロレオロジー計測した。結果、全ての試料において、濃度増加に伴う粘性率の上昇が観察され、またその濃度依存性はガラス転移点近傍の振る舞いを表す経験式に従った。細胞抽出液の粘性率は細胞内部の生理的な濃度（ ~ 0.3 g/mL）で実質的に発散していることがわかった。

次に、力学的非平衡な生きた細胞内部の混み合いガラス的挙動を明らかにすることを試みた。しかしながら従来のマイクロレオロジー計測手法は、細胞内部等の揺らぎが大きな試料中に適用できない。そこで本研究では、プローブ粒子の細胞内運動に対して、3次元のフィードバックにより追従する、細胞内部のマイクロレオロジー計測を実現した（図1）。生細胞内部（HeLa 細胞）の粘性率を測定すると、細胞内部もガラス的な挙動を示すことが分かったが、粘性率は細胞抽出液よりも低いこと、濃度増加に伴う粘性率増加挙動が細胞抽出液とは異なることも分かった。その違いを生み出す要因が細胞内部の非熱的な力学駆動にあるのではないかと示唆された。

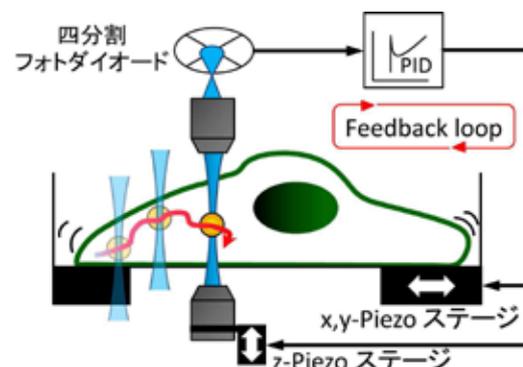


図1：細胞内部3次元フィードバック計

圧縮拘束されたアガロースゲルからの溶媒輸送挙動

(酪農大) 金田 勇

【はじめに】

我々はアガロースゲルを一定歪みで圧縮拘束した際の圧縮荷重変化と体積変化を同時測定し、圧縮によりゲルから絞り出される溶媒の輸送挙動を解析した¹⁾。圧縮荷重および体積変化の時間発展曲線は共に指数関数的に減衰しておりこれらの減衰曲線は伸長型指数関数で解析することができた。興味深い点は圧縮荷重緩和定数と溶媒流出の時定数がどのような条件でも一致することであり、この結果より圧縮拘束下のアガロースゲルからの溶媒輸送挙動は応力・拡散結合理論で説明できると考えられる。

アガロースは食品に汎用されているゲル化剤である。この多糖は高温で水に溶解し、それを冷却することで物理ゲルを形成する。製品に配合する場合は製造工程における冷却速度あるいは共存する様々な添加物によりゲルの物性が変化することが予想される。本研究ではそのようなケースを想定した様々な条件で溶媒輸送挙動を調べた。

【結果と考察】

1. クエンチング温度による溶媒輸送挙動変化¹⁾

アガロースはゾルーゲル転移温度の近傍でゲル化させるスピノーダル分解によりマイクロ相分離を起こし、その濃厚相でゲル化が進行する。一方で急激に低温にクエンチすると均一なネットワーク構造が形成される。そこで様々なクエンチ温度でゲルを調製し、溶媒輸送挙動を観察したところ、ゾルーゲル転移温度付近で形成させたゲルは深くクエンチしたゲルに比べ溶媒輸送速度が速いことが確認された。小角光散乱および電顕観察の結果とも合わせて考えるとこの温度ではマイクロ相分離構造がゲル化で凍結されていると考えられた。

2. 糖類およびポリオールの添加効果²⁾

アガロースは寒天の主成分であり、我が国においては和菓子のゲル化剤として汎用されている。和菓子には大量の糖類が甘味料として添加されているが、経験的に糖類の添加によりアガロースゲルの物性、特に離水現象が変化することが良く知られている。そこでグリセロール、ショ糖および低カロリー甘味料と注目を浴びているキシリトールの添加効果を調べた。これらの添加物は一様に溶媒輸送速度を低下させた。また同時にヤング率の上昇も観察され、その原因はゲルネットワーク構造の変化であることが電顕観察で確認された。

【参考文献】

- (1) I. Kaneda and S. Iwasaki "Solvent transportation behavior of mechanically constrained agarose gels" *Rheologica Acta*, 54, 437-443 (2015)
- (2) I. Kaneda and Y. Sakurai "Water/glycerol mixed solvent transportation behavior of mechanically constrained agarose gels" *Food Hydrocolloids*, 61, 148-154 (2016)

本研究は JSPS 科研費 JP25410231 の助成を受けたものである。

積分方程式理論で計算した電解質溶液中の同符号荷電粒子間実効相互作用

(九州大・理・化学) 秋山 良

【はじめに】

同符号荷電粒子間相互作用は真空中では斥力的である。しかし、電解質溶液中では必ずしもそうとは限らない。イオン雰囲気中で静電遮蔽が起きる事は良く知られているが、もっと異なった挙動も起きる。例えば、表面に負電荷を持つタンパク質分子の場合、多価カチオンを含む電解質溶液中において興味深い電解質濃度依存性を示す。電解質濃度が低い場合には、同符号に帯電したタンパク質は斥け合い溶液中に分散している。しかし多価イオン濃度が上昇すると共に、タンパク質分子たちは凝集する。これは蛋白質分子間に実効引力が発生する事を意味する。更に電解質濃度を上げるとその引力が消失して再び分散状態に戻る。この様に実効相互作用がリエントラントな振る舞いをするのである。同様な挙動は、電解質溶液中の DNA 溶液でも知られており、生体分子の構造化やそこから引き出される機能と結びついていると考えられる。こうした実効相互作用の変化について調べる為に、シンプルなモデル電解質溶液に対して液体の積分方程式理論に基づく計算を行った。

【結果と考察】

電解質中のマクロアニオン間の実効相互作用を計算するために荷電剛体球モデルを採用した。液体の積分方程式理論の1つである HNC-OZ 理論を用いて各種相関関数を求めて、実効相互作用やその分解等の解析を行った。

計算結果は、実験結果と良い対応を示す。すなわち、クーロン相互作用が熱エネルギーに比べてそれほど優勢で無い場合には所謂静電遮蔽の振る舞いが見られる。しかし、クーロン相互作用が優勢になると、上で述べた様なリエントラントな挙動が見られるようになる。電解質濃度の上昇と共に斥力的であったマクロアニオン間実効相互作用が引力的になり、更なる電解質濃度上昇でその引力が消失するのである。相関関数を使って分析した所、マクロアニオン間実効引力は小カチオンによって媒介されている事が分かった。共有結合の古典描像と同じく、図1の様な位置に小カチオンが高い局所濃度で存在する事で同符号電荷間相互作用が実効的に引力的になるのである。一方で、引力の消失についても議論出来た。周囲に漂う小アニオンが図1の媒介サイトの小カチオンを引き抜く事が原因と考えられる。この引き抜きは電解質の濃度の上昇と共に強くなるため、電解質が高濃度になると実効引力が消失するのである。

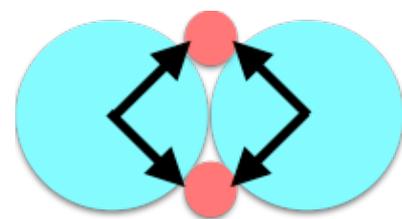


図1：小カチオン（赤丸）が媒介するマクロアニオン（青丸）間の実効引力。

【参考文献】

- (1) Ryo Akiyama and Ryo Sakata, J. Phys. Soc. Jpn., 80, 123602-1-4(2011).
- (2) Shingo Fujihara, and Ryo Akiyama, J. Mol. Liq., 200, 89-94(2014).

二成分溶媒中の高分子電解質鎖のコンフォメーション変化

(京都大学 理学研究科) 荒木 武昭

【はじめに】

高分子電解質は電荷を持つ高分子のことを言い、タンパク質や DNA などの生体物質として、また多くの工業製品として、我々の周りに広く存在する重要な物質である。高分子電解質溶液の性質は、電荷量の他に、高分子鎖のコンフォメーションや凝集構造に大きく依存することが知られている。モノマーに働く相互作用は、溶液に塩を添加したり、溶媒を変えたりすることで制御することができ、結果、高分子鎖は様々なコンフォメーションを取ることができる。例えば、水溶液に有機溶剤を添加すると、溶媒の誘電率が下がり、高分子電解質の電離度が小さくなる。電離度が小さくなると、塩の添加による静電相互作用の遮蔽効果とともに、モノマー間の静電斥力相互作用が弱められ、混合溶媒が貧溶媒なら高分子鎖はコンパクトなグロビュール状態へと変化する。このとき、二成分溶媒がバルクで混合状態にあれば、通常、高分子溶液でも均一に混ざっていると仮定される。我々は、二成分溶液中の濃度場が均一とは限らず、その不均一性が高分子のコンフォメーションに影響を及ぼすと考え、その挙動を調べるべく数値シミュレーションによる研究を行った。

【結果と考察】

コロイド分散系の挙動を調べるべく開発した流体粒子ダイナミクス法を拡張し、二成分溶媒中での高分子電解質の挙動を調べた。高分子鎖のコンフォメーション変化の他、混合溶媒の濃度不均一性による臨界カシミール力、塩の影響による静電相互作用の遮蔽、高分子電解質鎖の電離度の変化などを考慮した数値計算を行った。図 1 は、二成分溶媒中の高分子鎖の形状を示したものである。混合溶媒は、高分子と親和性の高い成分を 20% 含んでおり、溶媒成分間の相互作用パラメータ χ を変化させた。バルクでは、 $\chi > 2.31$ で相分離、 $\chi < 2.31$ で混合状態にある。(a) では、混合状態から相分離状態へ、(b) では相分離状態から混合状態へと変化させた。相分離点から離れた混合状態では、静電相互作用のため、やや広がったセミフレキシブルな状態になっている。一方、相分離状態では、親和性の高い成分が液滴状になり、その中に高分子鎖を取り込んだものとなっている。また、混合状態で相分離点に近づけていくと、相分離する前に、溶媒濃度の不均一性に起因する臨界カシミール力により、コンパクトなグロビュール状態へと一次転移することが示された。エタノール沈殿で用いられるような混合溶媒では濃度揺らぎが重要な役割を果たすことを示唆する興味深い結果となっている。

【参考文献】

(1) Takeaki Araki, *Soft Matter* **12**, 6111-6119 (2016).

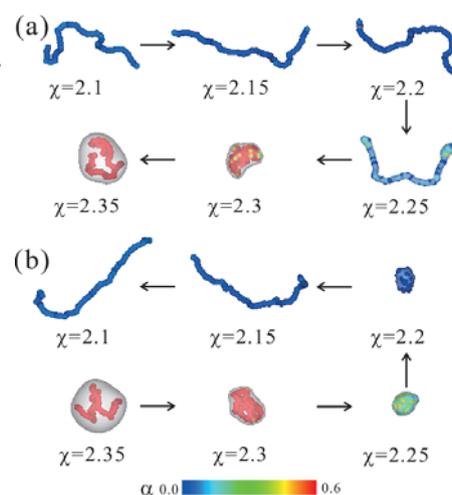


図 1 二成分溶媒中での高分子電解質のコンフォメーション変化の様子。(a)混合状態から、相分離状態へ。(b)その逆。高分子鎖の色は電離度を表しており、赤い領域ほど高い。

強誘電ゆらぎを經由した反強誘電相転移

(東大生研) 高江恭平、田中肇

【はじめに】

電気双極子を有する粒子反強誘電相転移を示す分子動力学モデルを提案する。このとき、粒子の形状が重要である。例として楕円体粒子を考える。図1にみられるように、双極子相互作用は粒子の相対位置に依存して符号を変えるため、楕円体のアスペクト比が1に近い(形状が球に近い)とき、各粒子間の双極子相互作用は引力が優勢であり、低温で強誘電秩序が発現する。対して、楕円体のアスペクト比が大きいとき、立体斥力のため双極子間の引力相互作用は弱められ、斥力が優勢となるため、低温で強誘電相とは異なる秩序が発現することが期待される。このように、粒子の形状を変えたとき、どのような秩序が、どのようにして生ずるかを研究する。

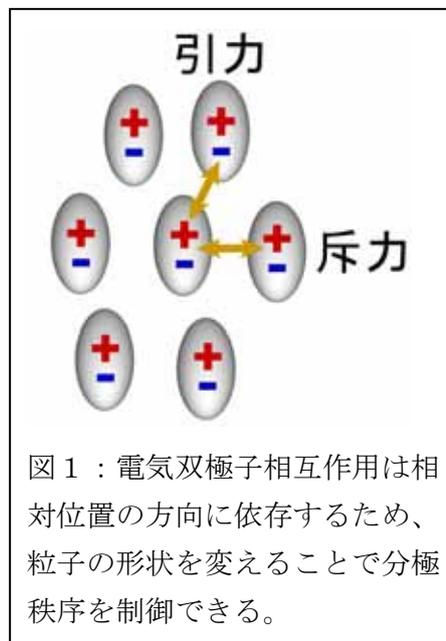


図1：電気双極子相互作用は相対位置の方向に依存するため、粒子の形状を変えることで分極秩序を制御できる。

【結果と考察】

分子動力学のモデルとしては、文献[1,2]において提案したモデルを用いる。このモデルでは、粒子間の相互作用が粒子配向に依存しており、形状異方性を制御するパラメータを導入することで、粒子の異方性を簡単に制御できるようにしている。この粒子からなる結晶において、形状異方性を制御したとき、融点直下の高温では常誘電結晶(配向が乱れた結晶、柔粘性結晶)が生ずるが、低温においては、異方性が弱い場合は強誘電秩序が生じ、異方性が強い場合には反強誘電秩序が生ずることを見出した。特に反強誘電秩序が生ずるとき、一旦強誘電ゆらぎが強く発達し、しかる後に反強誘電状態が成長してくるといふ、2段階の成長則がみられる。このような特異な相転移は結晶構造の変化に由来する。つまり、この相転移は結晶構造の変化を伴う構造相転移であり、高温の常誘電結晶では FCC あるいは HCP 構造であるが、強誘電相では(111)面内において1方向に引き伸ばされた Rhombohedral 相になり、反強誘電相ではさらに(111)面がスライドすることで Body-Centred-Monoclinic 相へと転移する。講演では各秩序をどのように特徴づけるか、秩序化の動力学とそのときの粒子スケールでの運動、電場応答、フェリ相が発現する可能性について考察する。

【参考文献】

- [1] K. Takae and A. Onuki, Phys. Rev. E **89**, 022308 (2014).
- [2] K. Takae and A. Onuki, unpublished.

界面濡れ秩序が誘起する液晶配向転移

(理化学研究所) 謝 曉晨・荒岡 史人

【はじめに】

基板/液晶界面付近における対称性の破れに起因する局所界面秩序は、バルクがつくるそれとは異なることが多い。例えば、液体における界面付近の擬似ネマティック秩序や擬似スメクティック秩序が典型的な例である[1-3]。これら界面に特化した秩序の種類や生成のしやすさは、主に基板と液晶の相互作用の性質と強さによって決まり、連続性を介してバルクの物性に大きな影響を与える。一般的に、こうした界面秩序構造を仮定しないネマティック液晶(NLC)を特定の状態に配向させると、温度を変化させても配向の状態そのものは変化せず、アンカリング強度が温度の下降とともに強くなる。これは、液晶のオーダーパラメータの上昇と基板/液晶間の相互作用の増強とに起因すると考えられている。しかし、特異的な界面秩序が存在していると、一般的な配向・アンカリング特性に従わない異常な振る舞いを示すことがある[4-6]。本発表では、ネマティック液晶(NLC)がフッ素系高分子表面で作るスメクティックA(SmA)濡れ構造がサーモダイナミックに変化することによって、バルクの液晶配向転移を誘起する現象について、実験と理論の双方からの結果について紹介する。

【結果と考察】

本研究では、フッ素系高分子(CYTOP CTX809, 旭硝子)を配向材としてスピコート成膜し、液晶セルを作成した。液晶材料には、負の誘電異方性をもつCCN47(相系列: SmA (303K) N (331K) I)を用いた。本系の配向状態は、N相高温域において水平配向(P), N相低温域において垂直配向(V)を示し、昇温・降温により相互に不連続転移する。この転移は一次転移的であり、約5Kと大きなヒリテリシスを伴う($T_{P \rightarrow V} \sim 321\text{K}$ @降温, $T_{V \rightarrow P} \sim 326\text{K}$ @昇温)。本系の界面付近では特異な構造が生じており、熱力学的にその構造またはサイズが変化しているのではないかと予測される。これを確認するために、微小角入射X線回折実験(GIXRD)を行った。すると、CYTOP/液晶界面において、液晶分子が層状に積み重なった界面擬似SmA構造(ISWS)を構築し、このサイズが温度とともに変化することがわかった。特筆すべきは、このISWSはNLCバルクよりも秩序が高くありながら、NLC中に溶け出したりせず、温度降下とともに発展しながら安定に存在することである。GIXRDにより見積もられたISWSの平均サイズの温度依存はヒステリシスを示し、顕微鏡でマクロに観察される配向状態の温度ヒステリシスと一致することから、ISWSの発展がバルク配向状態の遷移に大きな影響を与えていることが明らかとなった。発表当日では、Rapini-Papoular論に基づく数値計算と実験との整合性、及び理論から導かれる液晶のアンカリング特性について紹介をする予定である。

【謝辞】 本研究は、JSPS科研費 16H06037 の助成を受けたものです。

【参考文献】 1. S. Bardon et al., *Langmuir* 14, 2916 (1998). 2. K. Kocevar et al, *Phys. Rev. E* 62, R3055 (2000). 3. S. Aya et al., *Phys. Rev. Lett.* 106, 117801 (2011). 4. J. S. Patel and H. Yokoyama, *Nature* 362, 525 (1993). 5. T. Shioda et al, *Phys. Rev. E* 67, 041706 (2003). 6. S. Dhara et al., *Phys. Rev. E* 79, 060701 (2009).

両親媒性ヤヌス粒子 - 水 - 油 3 成分系で形成される 内部構造の組成比依存性

(九大院理) 野口朋寛, 岩下靖孝, 木村康之

【はじめに】

両親媒性ヤヌスコロイド粒子(AJP)は、親水半球面と疎水半球面を持つシンプルな異方性微粒子である(Fig. 1)。その粒子構造の界面活性分子との類似性およびメソスケールの粒子サイズから、特異な凝集・秩序構造の形成や優れたエマルジョン化能が期待され、研究されている¹。しかしながら AJP - 水 - 油 3 成分系において、形成される構造の組成比や粒子構造への依存性は十分には明らかにされてはいない。そこで本研究では、特に組成比 (AJP と少数液相の体積比) に注目し、実験によりその依存性を解明することを目指した。AJP と水、*n*-dodecane を水が少数液相となるように試料を作製した。 ϕ (= 水の体積/AJP の体積)を変化させ、顕微鏡を用いて形成された構造を観察した。

【結果と考察】

粒径 3.0 μm の球状シリカ粒子の半球面に金を蒸着し、その金面を 1-octadecanethiol で修飾し疎水性を付与することにより AJP を作製した。これと水、*n*-dodecane を超音波によって微細に混合した。このとき、水は AJP のサイズよりも小さく破碎されていた。その後、試料を穏やかな攪拌の下で構造形成させた。

形成された構造は、 ϕ の増加にともなって、micelle-like cluster から spherical swollen micelle(球状液滴)へと変化した(Fig. 2)。 $\phi < 0.7$ のとき、親水面が内側を向いた逆ミセル状の micelle-like cluster を形成された。また、これは ϕ の増加とともに一次的に成長し rod-shape となった。これは AJP - 親水溶媒 2 成分系の先行研究²と同様、AJP の半球面間への凝集力が働いたためと考えられる。一方、 $\phi > 0.7$ のとき、形成された内部構造はほぼすべてが球状液滴となり、液滴の平均半径は ϕ の増加とともに単調に増加した。この結果は、通常の等方粒子による Pickering emulsion の形成過程で見られる limited coalescence に基づく簡単なモデルでよく説明できることが分かった。また、液滴表面の粒子の被覆率から液滴表面に吸着した粒子量を見積もった結果、試料中のすべての粒子量にほぼ等しいことが分かった。よって、AJP は全粒子が水 - 油界面の安定化に寄与する理想的な界面活性挙動を示すことが分かった。



Fig.1 AJP の模式図。

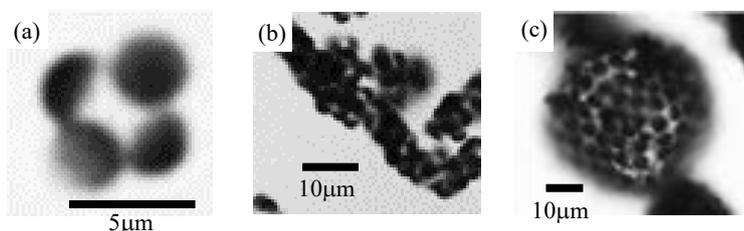


Fig.2 形成された凝集体の構造変化。(a)は micelle-like cluster ($\phi = 0.09$)、(b)は rod-shaped cluster ($\phi = 0.27$)、(c)は spherical swollen micelle ($\phi = 2.24$)。

【参考文献】

- (1) S. Jiang, Q. Chen, M. Tripathy *et al. Adv. Mater.* **2010**, *22*, 1060–1071.
- (2) Q. Chen, J. K. Whitmer, S. Jiang *et al. Science* **2011**, *331*, 199-202.

アクティブスイマー ～自発的に泳ぐ液滴から微生物～

(京都大学・理学研究科) 市川 正敏

【はじめに】

低レイノルズ数領域では、粘性によるエネルギー散逸が大きく、相対的に慣性の効果が弱い。そのため、粘性流体中で微小粒子が持続的に運動するためには、駆動し続ける機構が必要である。その様な自家発生的な駆動力をもつ物体はアクティブマターとも呼ばれ、個々の運動や集団が示す転移現象などの研究が盛んになっている。生物はもちろんアクティブマターの中でも最も複雑なシステムであり、興味深い研究対象である。しかし、まったくの無生物でも自発的に運動する系や自発的に運動していると見做せる系も、モデル系としてやその芳醇なふるまいに興味を持たれて研究が盛んになってきている。例えば、基板表面に乗せた液滴が表面張力の異方性によって自発的にうごく現象などが古くから報告されている[1]。当時はうごく事自体に関心を持たれていたが、その後、生物にも似た振る舞いを見せる系なども発見され、異なる面白さを示しつつある[2,3]。更に近年、基板の上ではなく水中で自発的に泳ぐ液滴も見出されてきている。その中の一つとして、化学マランゴニ効果によって自発駆動する微小油中水滴が挙げられる[4]。この水滴は、ペクレ数が閾値を超えると動き始め、直進運動する。我々は、ペクレ数による目安よりも大きいサイズの水滴を用いて実験を行い、直進運動とは異なる往復振動運動を示すことを新たに見出した。この様な水中で泳ぐ液滴は、流体现象という視点で微生物と比較すると相似的な面もあり、その様なモデル系としても発展が有るかもしれない。

このような動く液滴の研究を概説しつつ、液滴から人工細胞、微生物など、我々の最新の研究を紹介する[5]。

【参考文献】

- (1) M. Ichikawa, et al., Phys. Rev. E 88, 012403/1-8 (2013), and references there in.
- (2) Y. Sumino, et al., Phys. Rev. Lett., 94, 068301/1-4 (2005).
- (3) Ken H. Nagai, et al., Phys. Rev. E, 71, 065301/1-4 (2005).
- (4) Izri, Z., et al., Phys. Rev. Lett., 113(24), 248302 (2014).
- (5) F. Takabatake, et al., J. Chem. Phys. 141, 051103 (2014); H. Ito, et al., Phys. Rev. E 92, 062711/1-8 (2015); Y. Nishigami, et al., Sci. Rep. 6, 18964/1-11 (2016).

超音波ドップラー法によるレオロジー物性の空間分布の定量可視化

(北海道大学 工学研究院) 村井祐一, 芳田泰基, 田坂裕司

【はじめに】

液状または液相が主体となる混合物質のレオロジー物性を計測する新しい手法を開発した。媒体にせん断を与え、その流速分布から運動量拡散方程式を経由して求める方法である。この速度分布計測には超音波ドップラー流速分布測定法(UVP: Ultrasound Velocity Profiler)を用いる。これにより不透明媒体でも内部組成の空間分布に伴うせん断粘度、降伏応力などの物性値の分布が取得できる。これまでに著者らは[1]~[6]の手法を段階的に開発してきた。特に、粘弾性流体や気泡混合液体に対して、実効粘度、弾性率、降伏応力をわずか数秒で一括して計測可能であることが特徴である。化学反応や熱加工などで経時変化を伴う場合にも適用性が高く、オンライン計測に期待されている。

【結果と考察】

今回は食品や果物のレオロジー物性を測定する試みを行った。上図はトマト1つを円筒水槽にいれ 4MHz の超音波パルスの繰り返しによりドップラーシフト分布を検出し、それを円筒座標系に復元したものである。この図は一見、トマトの CT 画像に似ているが、トマト表皮や内部の音響インピーダンスの情報が圧縮されている。例えば果実の硬度をこの情報から引き出し、しいては硬度と相関の高い糖度を推定することも可能となる。このほか牛乳、ヨーグルト、デンプン溶液、ゲル状食品（商品名はフルーチェ）、具を含むカレーのルーなどにも適用試験を実施し、実効粘度の空間分布や、フローカーブ（粘度特性曲線）、フローサーフェス（粘弾性特性曲面）などのレオロジー物性を抽出することに成功した。



【参考文献】

- (1) T.Shiratori, Y.Tasaka, Y.Murai, Rapid rheological characterization of a viscoelastic fluid based on spatiotemporal flow velocimetry, *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 71, pp. 1-13 (2016)
- (2) Y.Murai, T.Shiratori, I.Kumagai, P.A. Ruehs, P.Fischer, Effective viscosity measurement of bubble/particle mixture at high volume fraction by interfacial rheometry, *Flow Measurement and Instrumentation*, Vol. 41, pp. 121-128 (2016)
- (3) T.Nakashima, T.Shiratori, Y.Murai, Y.Tasaka, Y.Takeda, E.J.Windhab, Viscoelastic responses of flow driven by a permeable disk investigated by ultrasound velocity profiling technique, *Flow Measurement and Instrumentation*, Vol.48, pp.97-103 (2016)
- (4) Y.Tasaka, T.Kimura, Y.Murai, Estimating the effective viscosity of bubble suspensions in oscillatory shear flows by means of ultrasonic spinning rheometry, *Experiments in Fluids*, Vol. 56: 1867(p13) (2015)
- (5) T.Shiratori, Y.Tasaka, Y.Oishi, Y.Murai, Ultrasonic velocity profiling rheometry based on a widened circular Couette flow, *Measurement Science and Technology*, Vol. 26: 085302 (2015)
- (6) T.Shiratori, Y.Tasaka, Y.Murai, Y.Takeda, Development of ultrasonic visualizer for capturing characteristics of viscoelastic fluids, *Journal of Visualization*, Vol. 16, pp. 275-286 (2013)

動的非平衡クロス効果：動く温度勾配下の流れと秩序

(九大院理) 福山 達也、前多 裕介

【はじめに】

温度勾配下で溶質分子が輸送される現象 (Soret効果) は非平衡系の物理学の中心課題の一つである。Polyethylene glycol(PEG)高分子溶液中では、温度勾配下のSoret効果と二次的なPEG濃度勾配による拡散泳動の競合を通じて、溶質分子は様々な空間パターンで分布する非平衡クロス効果が生じる[1,2]。しかし従来の研究は静的な温度勾配下での分子輸送を対象としたものがほとんどであり、変動する温度場で起こる現象に関する研究は十分でない。そこで本研究では、動く温度勾配下の非平衡クロス効果について実験的・理論的解析を行った。

【実験結果】

実験においては PDMS チャンバーに 5.0% PEG20000 水溶液を封入し、赤外線レーザー (波長 1480nm) を一定速度で円形スキャンし、動く温度勾配を実現した (図 1 a)[2]。その結果、温度勾配が動く方向とは逆向きに溶液の流れが生じること、レーザー移動速度 2500 μ m/s で最大の流速 10.5 μ m/min に達することがわかった (図 1b)。動く温度勾配下では非平衡クロス効果のみならず、外場の変動に依存した流動現象が生じることを示している。

【理論モデル】

動く温度勾配下の流動現象の理論モデルを構築し、流速 u_{flow} として次式を得た。

$$u_{flow} = -\frac{u_{laser}}{2} (\beta + \delta c_0 S_T) \gamma (1 - e^{-l/f\tau}) \Delta T^2 \quad (1)$$

図 1c に示すように、 u_{flow} はレーザーの移動速度 u_{laser} とともに増加するが、ある速度で極大値をとる。この結果は、流動をうみだす物理的起源が「温度勾配の波 (温度波) の伝搬による熱膨張・粘性変化・熱拡散のクロストーク」にあることを意味している。

流動を生み出す圧力は壁の熱膨張に由来する。加熱された境界壁では熱膨張 $l/l_0 = \gamma \Delta T$ が起き、変形が緩和する過程で流体の体積は $\Delta V/V_0 = \gamma(1 - e^{-l/f\tau}) \Delta T$ だけ押し出される。

一方、流体の粘性は溶媒の温度変化 $-\beta \Delta T$ と溶質 PEG の濃度変化 $\delta \Delta c$ の双方に依存し $\Delta \eta/\eta = -(\beta + \delta c_0 S_T) \Delta T$ となる。温度波の内外に生じる粘性勾配は対称であるが温度波は一方方向に進み対称性を破るため、連続の式と Stokes 方程式を満たす解として、温度波と逆向きに整流された流動が生じる (図 1d)。

さらに、レーザーの移動速度 u_{laser} があがるにつれ流動は温度差のみで定まり、熱拡散により減衰してゆくことが明らかとなった。過去には Glycerol 溶液中での流動発生[3]が知られているが、流速が極大値を持つ点は温度波と変形する場に由来する新たな特性と考えられる。

【参考文献】

- [1] H.R. Jiang, H. Wada, N. Yoshinaga, M. Sano. Phys. Rev. Lett. **102**, 208301 (2009).
 [2] Y.T. Maeda, A. Buguin, A. Libchaber. Phys. Rev. Lett. **107**, 038301 (2011); Y.T. Maeda. App. Phys. Lett. **103**, 243794 (2013).
 [3] F. M. Weinert and D. Braun. J. App. Phys. **104**, 104701 (2008).

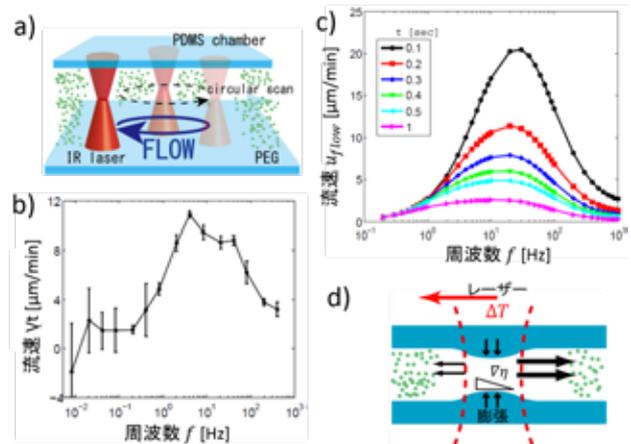


図 1 a)対象とする系 b)実験で観測された流速 c)流速の周波数依存性 d)理論モデルの概念図

工学的観点から見た近年の折り紙研究の動向

(筑波大学・システム情報系) 三谷 純

【はじめに】

工学分野における ORIGAMI をキーワードとした研究が、近年とくに国外で盛んに行われており、“紙を折って形を作る子どもの遊び”というイメージが根強い「折り紙」が、新しい転機を迎えている。2012年に NSF(アメリカ国立科学財団)によって、Origami Design と Self-assembling System をキーワードとした研究に対する規模の大きい補助金が設けられて以降、とくにロボティクスの分野で自己折り (Self folding) に関する成果が表れ始めている。従来、折り紙の研究分野においては、組織だった研究があまりなされて来なかったが、この後押しによって、数学分野と工学分野の研究者による共同での取り組みが見られるようになった点は注目に値する。本発表では、以下に述べる折り紙設計と自己折りについて、近年の研究動向について紹介する。

【折り紙の幾何と設計】

一般に広く親しまれている折り紙の多くは平坦に折りたたまれる。平らな状態になる折り紙は「平坦折り紙」と呼ばれ、平面に記された折り線のパターン (展開図) と、それを折った後の関係が過去盛んに研究されてきた。現在では、目的の形や構造を持つように紙を折りたたむことが可能となり、「折り紙設計」の理論は曲線での折りを持つもの (図 1) や、折り操作の過程における変形の扱いなど、より高度な内容が議論されるようになってきている。

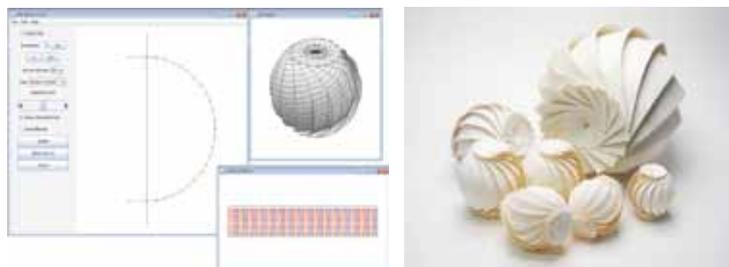


図 1 立体折り紙設計ソフトウェア⁽¹⁾ (左) と、制作された球形の立体折り紙 (右)

【折り紙の自己折り】

折り紙の機能を実用化するにあたっては、その折りのプロセスの効率化が欠かせない。例えば量産品を対象とする場合には、低コストで折り工程を実現することが必須であり、人手を介さない折りたたみが望まれる。しかしながら、ロボットによる紙の折りたたみは課題が多く実用には至っていない。そこで、平坦な素材 (紙に限らない) が、人の手や機械による折り操作を介さず、自律的に折りたたまれるようにする研究が盛んに行われている。とくに、自律的な折り操作は、手先では困難なほどの微小な折りが必要な場合にも有効である。

【参考文献】

- (1) Jun Mitani, ORI-REVO: A Design Tool for 3D Origami of Revolution, http://mitani.cs.tsukuba.ac.jp/ori_revo/, (2016/08/24 アクセス)

Ultra-Soft Potential 液体のクラスターガラス転移

(名古屋大学・理学・物理) 宮崎州正、宮崎涼二、川崎猛史

【はじめに】過冷却液体のガラス転移は、極めて普遍性が高い現象であるにも拘わらず、その本質は未解明である。その理由の一つとして、従来のほとんどの理論研究が、レナード・ジョーンズポテンシャルや剛体球のような単純なモデル液体ばかりを対象にしてきたことが挙げられよう。これらはいずれも短距離斥力が支配的な系であるが、単純すぎて出てくるデータにシステム依存性があまり出てこず、似たり寄ったりの結論しか導けないのだ。そこで最近、我々は、いろいろな角度から理論との比較が容易にできるような新しい研究方法を探している。特に注目しているのが、まったく新しい相互作用を用いることである。今回報告するのは、「一般化

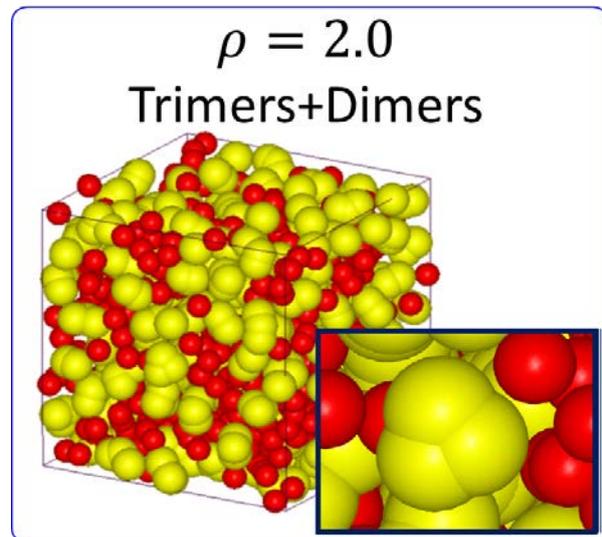
Hertz モデル」と呼ばれる一連のモデルの研究成果である。一般化 Hertz モデルとは、相互作用ポテンシャルが、 $v(r) = \alpha(1-r)^a$ ($r > 1$) で与えられるような系のことである。ここに出てきた指数は、 $a=2$ の場合は調和ポテンシャル、 $a=5/2$ の場合は Hertz ポテンシャルと呼ばれており、しばしばコロイドガラスの研究で用いられている。このポテンシャル系は $r=0$ で斥力が発散することがなく、粒子二つが完全に重なることさえできるので、ultra-soft potential 液体と呼ばれている。ultra-soft potential 液体は、その「柔らかさ」のために、ときに直観に反する様々な特異な熱力学的な振る舞いをする事が知られている。当然この系のガラス転移も特異になるであろう、というのが我々の動機の一つであった。

【結果と考察】

我々は、特に一般化 Hertz モデルの指数 a が 2 以下である場合のガラス転移に注目した。先行研究で、この場合の結晶状態に「クラスター相」と呼ばれる、何個もの粒子が重なって、一格点点を構成するような、超格子構造が予言されていたからである。我々はこの系をガラス化しやすいように二成分系にして数値実験を行ったところ、右図に示すようなガラス相が実現することを発見した。そのダイナミクスや構造（粒子配置）などを詳細に調べた結果、密度の増大とともに、通常の一粒子（モノマー）からなるガラスから、段階的に二粒子（ダイマー）のガラス、トリマーガラスへと変化することがわかった。いわゆる glass polyamorphism が見つかったわけだが、その様子は、液体・液体転移のそれによく似ている。さらに異なるガラス相の相境界のダイナミクスが、高次ガラス転移と呼ばれる系に特有の特異性を持つことも分かった。いずれも従来の液体モデルでは見られなかった新規現象である。

【参考文献】

(1) Ryoji Miyazaki, Takeshi Kawasaki, and Kunimasa Miyazaki, Phys. Rev. Lett. (in press), arXiv:1604.05886



ガラスにおける秩序-無秩序転移

(名古屋大学 大学院理学研究科) 氏名 池田晴國

本講演では多成分合金の秩序-無秩序合金転移との類推から、多成分系のガラスを区別・分類しようという試みを紹介する。説明の為に、二成分合金における秩序合金と無秩序合金の模式図を図 1 に示した。無秩序合金相では、紫色の格子は赤か青の粒子のいずれによって埋められていても良い。

一方で、秩序合金相では、赤色の粒子と青色の粒子はそれぞれ決まった格子のみを占めることが出来る。換言すれば、無秩序合金とは、粒子の並進に対する自由度は凍結しているが粒子の種類に対する自由度が残った状態であり、秩序合金とは、並進と粒子の種類の交換の両方の自由度が凍結した相である、とすることが出来る。

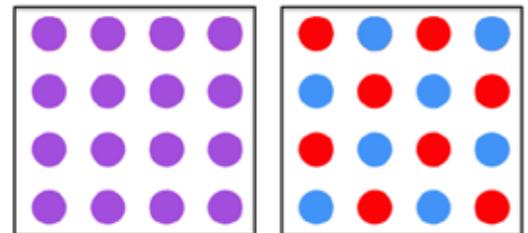


図1: (左)無秩序合金 (右)秩序合金

我々はレプリカ液体論[1]と呼ばれる理論を用いることによって、この無秩序/秩序合金の概念をガラスへと拡張することを試みた。レプリカ液体論では液体とガラスを区別する為に、元の系と非常に弱く相互作用する複製（レプリカ）

を考える。液体相では、異なるレプリカは全く独立に動き回ることが出来る(図 2 左)。一方で、ガラス相では系のエルゴード性が破れる為に異なるレプリカの配置に相関が生まれる。この時、レプリカ間の位置だけが強く相関して、粒子の種類については相関が無い無秩序ガラス(図 2 中)と、粒子の位置と種類の両方について相関がある秩序ガラス (図 2 右) の二種類の相を考えることが出来る。

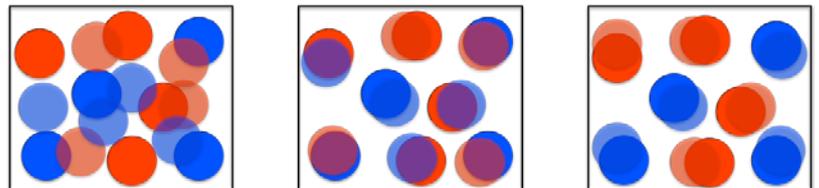


図2: (左)液体 (中)無秩序ガラス (右)秩序ガラス

我々はこの二つの相に対応する解を構成し、平均場模型を用いてその間の転移を解析的に計算した。その結果、少なくとも平均場極限では、二つの相は熱力学的に異なった相であり、温度や密度を変化させていくと片方からもう片方のガラス相へのガラス-ガラス転移が起こることが明らかになった。講演では実際のシミュレーションや実験においてこの現象を観測する為にどのような物理量を観測すれば良いのかについても言及する。

【参考文献】

- [1] G. Parisi and F. Zamponi, Rev. Mod. Phys, **82**, 789 (2010)

周期剪断下高密度分散系の粒子軌道に関する可逆・不可逆不連続転移

(名古屋大学理学部物理教室) 川崎猛史

【はじめに】

コロイド分散系に、振動振幅の大きな周期剪断をかけると、1周期を経ても粒子は元の場所に戻って来ない不可逆軌道で運動する。一方、振動振幅が小さい場合、定常状態においては1周期を経てすべての粒子が元の場所に戻ってくる可逆軌道が得られることが報告されている(1)。ここでは、一旦すべての粒子が可逆軌道で運動するようになると、二度と不可逆な軌道には戻らないことから、この可逆軌道はある種の吸収状態であると言える。一方、低体積分率のコロイド分散系においては、振動振幅に対して、ある特徴的な振動振幅を越えると不可逆軌道を取る粒子数が連続的に増大することが報告されている(2)。この様な振舞いは、他の多くの吸収状態転移と類似しており、これらの間には普遍性が存在するものと考えられている(Directed Percolation 普遍クラスなどと称される)。上記の粒子軌道に関する研究は、分散粒子が流動しやすい低体積分率の系で得られた結果であるが、一方、粒子が固体的になる高密度分散系における報告は少ない。そこで我々は、計算機実験により高密度分散系における粒子軌道の吸収状態転移について調べた(3)。

【結果と考察】

本研究では、3次元の分子動力学シミュレーションを行った。粒子を非熱的な Langevin 方程式で駆動させ、Lees-Edwards 境界条件を用い、剪断ひずみが $\gamma(t) = \gamma_0(1 - \cos \omega t)$ と周期的に変化する剪断流を与えた。粒子間には2体の単純斥力ポテンシャル: $U(r) = (\varepsilon/2)\{1 - (r/a)\}^2$ を与え、粒子の体積分率は $\phi = 80\%$ に固定した。なお、本系におけるジャミング転移点は、およそ $\phi_j = 65\%$ であり、扱った系は固体的である為、本系には弾性領域が存在し、降伏応力が観測される。そこで、ひずみの振動振幅 γ_0 を変化させた際の粒子軌道を調べた結果、高密度分散系でも粒子軌道に関する可逆・不可逆転移が観測された。ところが、先行研究(1, 2)で示された密度が低い場合とは異なり、粒子軌道は、ひずみの振動振幅 γ_0 に対して不連続に転移することが分かった。さらに、この不連続転移は、応力・ひずみ (γ_0) 曲線における降伏点において起こることが明らかとなった。そもそも降伏点は、固体の弾性領域と塑性領域を分ける境界である。また、局所的には近接粒子からなるケージ構造を壊すのに必要なエネルギー障壁と降伏点での弾性エネルギーが釣り合う。このことから、上記のエネルギー障壁を超えるという過程は、動力学的にある種の活性化過程であると考えられる。平衡熱統計力学によると、熱活性化過程により、核生成などの不連続転移(1次相転移)が説明される。従って、高密度分散系での粒子軌道は、エネルギー障壁を超えるという過程と強く相関をもつために、不連続な変化を示すものと考えられる(3)。この様に、以上の結果は、吸収状態転移の理解に関する新たな一面を切り拓くものと期待される。

【参考文献】

- (1)D. J. Pine, J. P. Gollub, J. F. Brady, and A. M. Leshansky, *Nature* 485, 997 (2005).
- (2)L. Cort e, P. M. Chaikin, J. P. Gollub and D. J. Pine, *Nature Physics* 4, 420 (2008).
- (3)T. Kawasaki and L. Berthier, *Phys. Rev. E* 94, 022615 (2016).

対象点除去法とパーシステントホモロジーを用いた局所構造の抽出

(東北大 AIMR, JST-さきがけ) 中村壮伸

【はじめに】

パーシステントホモロジーとは乱れた構造のなかに埋め込まれている穴の秩序構造を抽出する手法である(1)。この方法では与えられた点データから構成される 0,1,2 次元の穴(クラスター、リング、キャビティ)の大きさを定量化する。パーシステントホモロジーは穴の大きさを2つの変数で定量化し2次元の散布図で表現される。穴は多数の原子により構成されるので、この散布図は2変数の多体分布関数と見なす事ができる(2)。発表者のグループは様々なガラスにあらわれる中距離秩序構造をパーシステントホモロジーを用いることで統一的に扱う事が可能であるという事を発見した(3)。一方、金属ガラスなどのような充填が支配的となるガラス構造ではある原子を中心とした20面体構造やFCC,HCPの局所構造が頻出する構造であり物性との相関が議論されている(4)。オリジナルのパーシステントホモロジーではここで議論されるような中心部に原子がある局所構造は扱う事ができない。これはガラスの構造を記述する上で問題とされていた。

【結果と考察】

我々はパーシステントホモロジーの手法を拡張する事により、このような特定の原子・分子を取り囲む局所構造を記述する新たな手法を開発した。発表では金属ガラスの20面体構造の抽出を例としてこの手法の紹介を行う。また、溶媒中の分子やポリマーなどへの応用について議論をする。

【参考文献】

- (1) H. Edelsbrunner and J. Harer, *Computational Topology: An Introduction* (Providence, RI: American Mathematical Society, 2010)
- (2) T. Nakamura, Y. Hiraoka, A. Hirata, E. G. Escobar and Y. Nishiura, *Nanotechnology* 26, 304001, (2015)
- (3) Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue and Y. Nishiura, *PNAS*, 113, 7035, (2016).
- (4) A. Hirata, et al., *Science*, 341, (6144), 376-379, (2013)

Slippery Interfaces -lubrication of director rotation-

(京大院理)山本 潤

【はじめに】 既存の多くの液晶表示素子では、電場により変形した液晶の配向を、電場 Off 時に初期状態に戻すため、ガラス界面でのアンカリング力が重要な役割を担う。一方で、強誘電性液晶 (FLC) (SmC*相)や、高分子安定化ブルー相では、液晶分子の配向方向はらせんによって自発的に初期状態に復帰するため、界面でのアンカリング力は必ずしも必要ではない。そこで我々は、界面のアンカリング力を0にする Slippery 界面を考案し、ダイレクターの回転運動の潤滑による駆動電圧の低減と高速応答性を両立させる原理を提唱した。特に、高分子安定化ブルー相では、内包される高分子-液晶のナノ界面を Slippery 化する必要がある。そこで、不純物や光誘起分子形状転移による Disorder 効果を用いて、Slippery 界面の自己組織的生成を可能とする原理を提唱した。

【結果と考察】 **1. Disorder 効果と自己組織化 Slippery 界面生成** 液晶相に不純物を加えると相転移点が低下することは良く知られている。さらに加えた不純物が特定の基板を好むと、基板付近の不純物濃度が上昇する。両者の効果により、等方-液晶相転移点付近では、基板近傍が先に等方相に融解することになる。そこで、基板・不純物・液晶の3者の組み合わせを注意深く選ぶと、融解した等方(液体)相が、基板上に薄膜状にぬれ、さらに液体薄膜上で液晶相が水平配向した状態を実現できる(図1)。これを自己組織化 Slippery 界面と呼ぶ。我々は、等方-液晶相転移点近傍で、アンカリングエネルギーがほぼ0となり、Slippery 状態が実現されていることを証明した。アンカリングが存在しないため、Slippery 界面の動的な状態を回転磁場下回転法により、表面粘性を測定した。図2に示すように、表面からの粘性トルクと磁場によるトルクの釣り合いから、透過光強度は磁場の回転角速度 ω に比例して大きくなり、この傾きから表面粘性 $\eta_s=2 \times 10^{-7} \text{N} \cdot \text{s/m}$ と求められる。さらに、表面にアゾ基を有するアクリレートモノマーにより液晶ゲル薄膜を界面に形成させ、温度依存性の少ない Slippery 界面の生成にも成功している。

2. Slippery 界面による低電圧駆動 SmC*と PS-ChBP

強誘電性液晶の水平電場モード(DH-FLC)や、高分子安定化ブルー相(PS-ChBP)は、100msec以下の応答速度を有している優れた材料であるが、これまで、非常に高い駆動電圧を必要とするために応用できなかった。図3に示すように、Slippery 界面を用いた DH-FLC モードは、1V/ μm という低電界での高速な応答特性の両立を実現した。

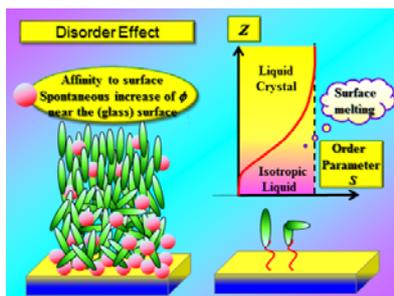


図1 Disorder 効果

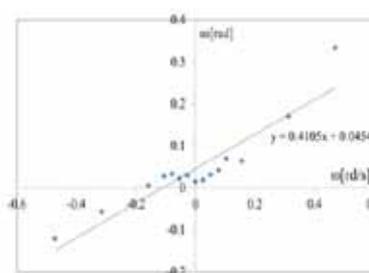


図2 表面粘性測定

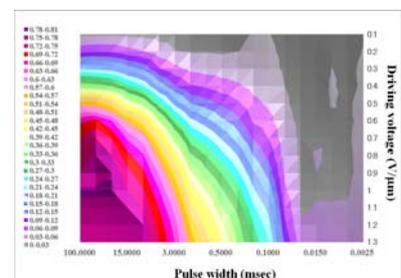
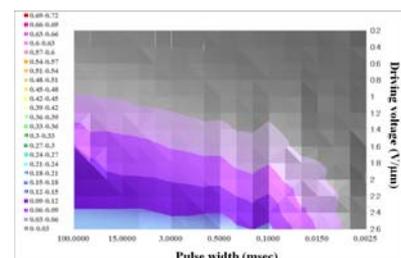


図3 Slippery SmC*による駆動電圧の低減化 (上図: Slippery 界面無、下図: Slippery 界面有)

オリゴマー溶媒中に分散したコレステリック液晶滴における熱駆動回転挙動

(理研・創発 C) 吉岡 潤、荒岡 史人

【はじめに】 コレステリック(Ch)液晶に対して熱流を印加すると配向方向が一方向に回転する現象は Lehmann 回転と呼ばれているが、その再現性は極めて低く未だ十分な実験的検証がなされていない[1]。近年、この Lehmann 回転の存在を示唆するものとして、温度勾配印加によって等方液体媒質中に分散している Ch 液晶滴上の組織が回転する現象が報告された (図 1,2) [2][3]。上記の現象は、複数の棒状液晶の混合系

(混合液晶系) における等方(I)相と Ch 相の間のわずか数°Cの共存領域という、極めて限定された状況下でのみ観測が報告されている。そのため、上記の系においてのみ発現する特異な現象であるか、あるいはキラリティを有した液晶系でさえあれば発現し得る普遍的な現象であるか、判別がつかない。そこで本研究では、現象の一般性を検証するため、液晶滴外部の等方液体を液晶分子以外の物質、具体的にはフッ素鎖系オリゴマーPF656 に置換し回転運動を誘起することを試みた (オリゴマー・液晶混合系)。

【結果と考察】 オリゴマー・液晶混合系において Ch 液晶滴を作製したところ、図 3,4 に示すように液晶滴上に U 字、8 の字状の組織が発現し (U 字、8 の字型液晶滴)、温度勾配を印加するとこれら両方において回転運動が誘起された。このとき、回転速度は印加した熱流に比例したため、以後回転の角速度 ω を熱流 j で割ったものを回転効率 ω/j と定義し回転速度を議論する。U 字型、8 の字型液晶滴における回転効率を、混合液晶系において発現する縞状および CC 型液晶滴における効率と比較したところ、図 5 に示すように U 字型および 8 の字型液晶滴においては縞状より数十倍、CC 型より数倍大きいことが判明した。このことは、回転運動を誘起するために混合液晶系を用いる必要性は無く、適切な試料の選定によって、回転の高速化、高効率化、安定化といった種々の目的に応じて系をより最適化できることを示唆する。詳細は発表で述べる。

- 【参考文献】 [1] S. Chandrasekhar, "Liquid Crystals", Cambridge University Press 2nd edition (1992)
 [2] P. Oswald and A. Dequidt, Phys. Rev. Lett. 100, 217802 (2008)
 [3] J. Yoshioka, F. Ito, Y. Suzuki, H. Takahashi, H. Takizawa and Y. Tabe, Soft Matter, **10**, 5869 (2014)

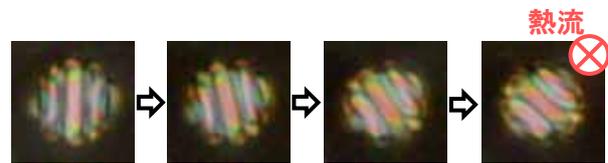


図 1:混合液晶系、縞状液晶滴における熱駆動回転運動(間隔:4sec、熱流:6.0mW/mm²)

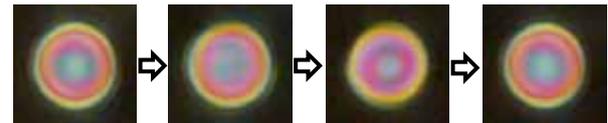


図 2:混合液晶系、CC 型液晶滴における熱駆動回転運動(間隔:1.2sec、熱流:6.0mW/mm²)



図 3:U 字型液晶滴における熱駆動回転運動(間隔:400msec、熱流:6.0mW/mm²)

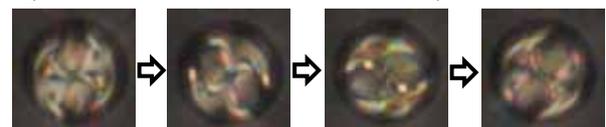


図 4:8 の字型液晶滴における熱駆動回転運動(間隔:400msec、熱流:6.0mW/mm²)

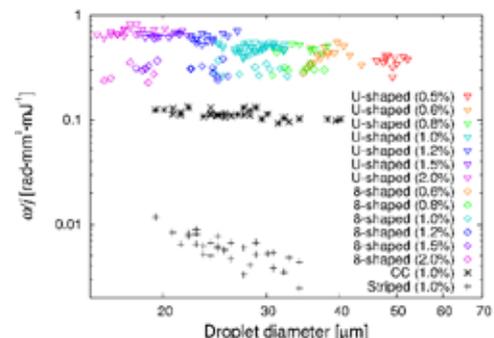


図 5:各液晶滴の回転効率の比較 (凡例内の数字: キラル添加剤濃度)

紫外光照射下に置かれたコレステリック液晶の配向回転

(1 早大理工, 2 各務記念材料技術研究所) 坊野 慎治¹, 里 紗弓¹, 竹井 翔洋¹, 多辺 由佳^{1,2}

【はじめに】

コレステリック(Ch)液晶に温度勾配を印加すると、レーマン回転と呼ばれる一方向の配向回転が生じる。近年吉岡らは、等方相中に分散した Ch 滴(直径: $R \sim 10 \mu\text{m}$)に温度勾配を印加するとレーマン回転が発現することを明らかにした^[1]。この報告では温度勾配により生じる熱流により配向回転が駆動される。一方、レーマン回転はキラル液晶に共通する交差相関の一つであり、Leslie による理論^[2]では、熱流に限らず何らかの流れが Ch 滴に印加されると配向回転が駆動されると予測されている。そこで本研究では、熱流の代わりに物質流を用いた配向回転の駆動を試みた。具体的には、アゾベンゼンを Ch 液晶に添加し、紫外光をセルの片側から照射する実験を行った。アゾベンゼンのトランス-シス異性体転移は紫外光の吸収を伴う転移であるため、紫外光の照射側からセル深さ方向に向かい、シス体の濃度勾配が生じると期待される。この勾配に沿ったシス体の流れによる Ch 滴の配向回転を調べた。

【結果と考察】

図 1 に入射紫外光強度 I_0 が 6% と 12% の場合について、トルクに換算した配向回転の角速度 $R^2\omega$ の有効アゾベンゼン濃度差 RC (C :アゾベンゼン濃度)に対する依存性を示す。アゾベンゼン濃度の増加に伴い $R^2\omega$ は加速し、十分濃度が高くなると飽和する。この挙動を紫外光照射により生じるシス体の物質流を考慮した Leslie 理論に基づき考察した。モデルの詳細は研究会当日に紹介するが、我々のモデルでは駆動される $R^2\omega$ は次の式であらわされる。

$$R^2\omega \propto I_0(1 - \exp(-2\bar{\alpha}RC)) \quad (1)$$

ここで $\bar{\alpha}$ 吸光係数である。式(1)を用いて実験結果をフィッティングした結果を図 1 中に点線で示した。我々の理論モデルは実験結果を良く再現していることがわかる。次に、飽和角速度 $R^2\omega(RC=\infty)$ の I_0 依存性を図 1 挿入図に示す。 $R^2\omega(RC=\infty)$ は I_0 に比例し加速する。この傾向は式(1)が予測する振る舞いと一致している。以上の結果から、紫外光照射により生じるシス体の物質流により Ch 滴の配向回転を駆動できることが明らかになった。

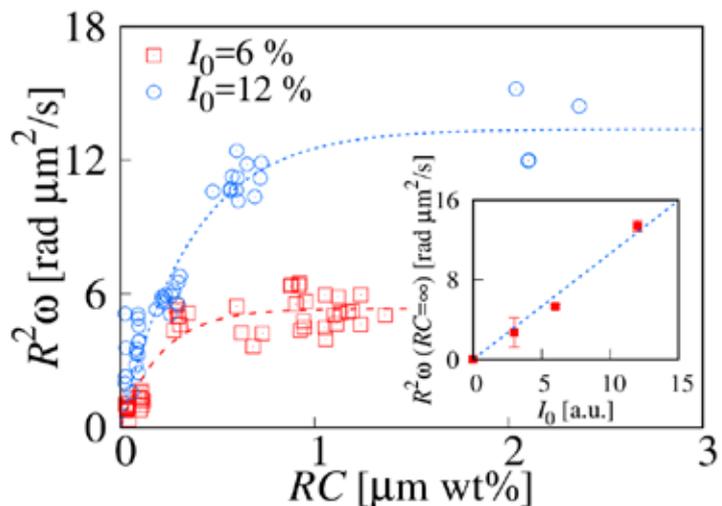


図 1. 規格化された角速度の有効アゾベンゼン濃度に対する依存性:点線は式(1)を用いてフィッティングを行った結果である。挿入図は飽和角速度の入射紫外光強度に対する依存性で、線形関数を用いてフィッティングを行った結果を点線で示した。

【参考文献】 [1] J. Yoshioka, et al., *Soft Matter*, **10**, 5869 (2014)

[2] P. G. De Gennes and J. Prost, “*The Physics of Liquid Crystals*” Clarendon Press, Oxford (1993)

本研究の一部は、JSPS 科研費 16H07290、早稲田大学と JX エネルギー株式会社との組織連携活動の助成を受けた。