

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成 14 年度採択研究代表者

土井 正男

(東京大学大学院工学系研究科 教授)

「多階層的バイオレオシミュレータの研究開発」

1. 研究実施の概要

生体および生体工学に関連する微小流動領域のレオロジー現象を取り扱う理論とシミュレータの開発、検証を行っている。特に、我々が 1998 年～2002 年に NEDO の大学連携プロジェクトにおいて開発したソフトマテリアルのための統合的シミュレータ OCTA の成果を引き継ぎ、(1) シミュレーション GUI 環境(GOURMET)の改良 (2) バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散系などの生体関連の複雑流体を扱う新規シミュレーションエンジンの開発 (3) 摩擦現象、乾燥・塗布の現象などに対する多階層的シミュレーション手法の構築および検証を行っている。

平成 18年度は、新規に開発したシミュレータ群”BRUNCH”の試作版の改良を行なった。昨年度までに作成した、バイオゲル、微粒子分散系シミュレータを改良し、さらに新規に高分子や DNA を扱うシミュレータを加えた。また多階層的シミュレーション手法の構築としてグラフト鎖表面間の粘着に関するシミュレーションを行なった。さらにバイオに関する問題として界面の実際の現象を確認するため実験も進めた。具体的には摩擦、粘着、液滴の蒸発について、簡易な生体モデルについて実験を行なった。

今後は、試作版の作成により確立されたシミュレータ技術を応用することを目指して、シミュレータの機能拡充、実験による検証を行う。さらに、従来のシミュレーションでは難しい問題に対して、多階層的シミュレーションを行う予定である。

2. 研究実施内容

(1)シミュレーション GUI 環境(GOURMET)の改良および機能拡張を進めた。本年度は、GOURMET 初学者のためのマニュアルを作成し OCTA 夏の学校 2006 を企画し GOURMET の普及を図った。

(2)新規シミュレータの開発として、昨年度に引き続き、バイオゲル、微粒子分散系シミュレータを改良した。また、新規に DNA シミュレータを開発した。

(a)バイオゲルシミュレータ:

イオン液体とカーボンナノチューブを用いた空中動作するソフトアクチュエータの基礎実験を行

い、動作原理をイオン液体の陽イオンと陰イオンの電気伝導による速い変形と電極に加わる電気的な応力による液体の移動に伴うゆっくりとした変形の重ね合わせで記述することで、シミュレーションにより実験結果を説明づけた。また、高分子液滴の乾燥とゲル化の過程のシミュレーションを目指し、メッシュ変形法(ALE)と表面曲率の計算による界面張力の計算機能を実装した。これにより、表面変形によるラプラス圧の効果で誘起される流れや、粘度変化による流れの減衰の効果、高分子液滴の乾燥過程での溶質分布の解析、表面に出来る高分子濃厚層の厚さ分布の解析を行った。

(b)微粒子分散系シミュレータ:

昨年度開発した電気泳動を含めた粒子シミュレータの整理を行った。壁近傍などの2体相互作用を調べ、電極付近で荷電粒子が凝集する効果を確認した(図1)。さらに、境界条件の見直しを行い沈降電位、電気泳動などに関して矛盾のない物理モデルの構築を行なった。

(c)DNAシミュレータ:

DNAや高分子の分散系のモデルとして球をバネで連結したモデルがよく採用される。また、この球の間に働く流体相互作用や境界壁の影響が重要となる。我々はSRD法と呼ばれる方法を用いて、流体相互作用、境界を含んだDNAモデルを作成した(図2)。

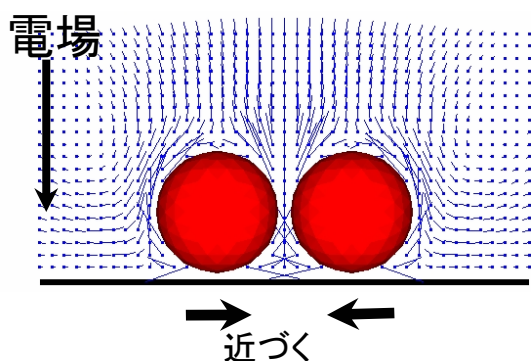


図1: 電極付近で凝集する荷電粒子

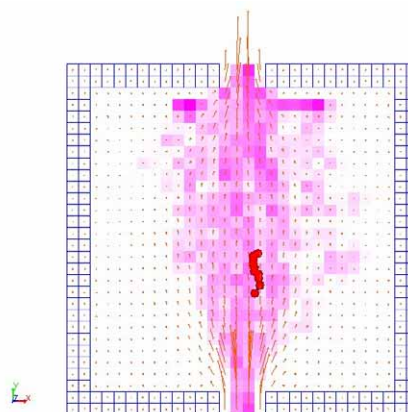


図2: 流路内を流れるDNA(赤色)。色の濃淡はDNAの存在していた頻度を表す

(3)多階層的シミュレーション手法の構築として、以下のように行なった。

(a)グラフト鎖表面間の粘着:

界面レオロジー現象の1つとしてマイクロな視点からグラフト膜間の粘着に関してとりあげ、グラフト密度をパラメータに剥離パターンを整理した(図3)。

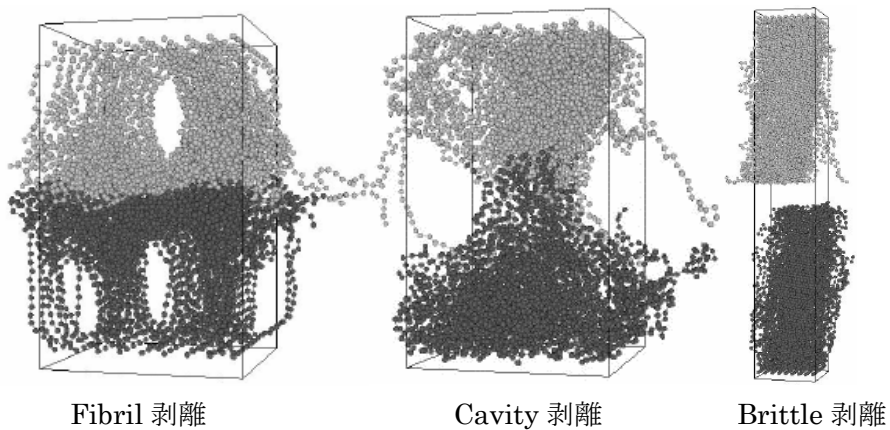


図 3 : グラフト鎖表面間の剥離パターン

(b) 高分子溶液の蒸発過程:

固体基板に広がった高分子溶液の蒸発過程のダイナミクスを記述する。モデルを構築し、溶媒の蒸発に伴い、自由表面付近に形成されるゲル状の膜について考察した。このモデルを用いた数値シミュレーションおよび理論的な解析によって、膜が形成されるための条件を与える表式を得た。

(c) バイオゲルの摩擦:

昨年度はバイオゲルのバルク物性が潤滑摩擦界面に影響を及ぼすことを明らかにした。今年度は、レーザー干渉法を用いて実際に潤滑摩擦界面の直接観察を試み、バイオゲルの変形や潤滑状態変化のダイナミクスを詳細に調べることができた。

(d) ソフトマター界面破壊ダイナミクスの解明:

粘着剤などの柔らかい粘弾性体を基板に接触させた後に引離すと、内部にできるキャビティにより物質の変形状態や力学的特性は大きく変化する。そこで、粘着剤内部のキャビテーション挙動を再現する 3 次元ブロックモデルの開発を行なった。図 4 に応力-歪み曲線の引離し速度依存性とキャビテーション挙動スナップショット（真下から見た図）を示した。実験において見られる引離し速度依存性や多数のキャビティが不均一に成長する様子を再現することができた。

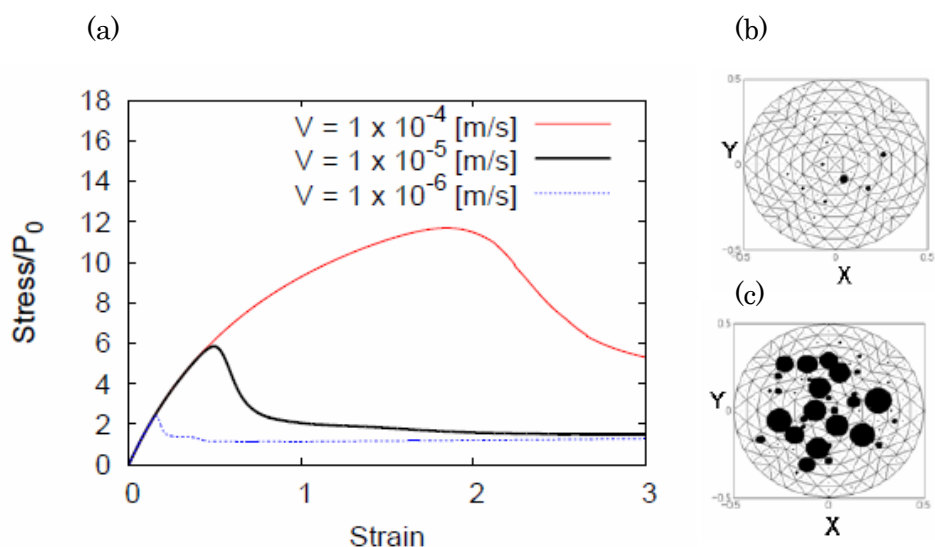


図 4：3D ブロックモデルにおける結果。(a) 3つの異なる引離し速度における応力-歪み曲線。 $V = 1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ での (b) $\varepsilon = 0.48$, (c) $\varepsilon = 1.5$ におけるキャビティ生成の様子。

3. 研究実施体制

(1) 「土井」グループ

① ループリーダー

土井正男 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

② 研究項目

- ・シミュレータの開発
バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散
- ・統合プラットフォームの開発
- ・多階層モデリングの実証

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表 (原著論文)

- Tetsuo Yamaguchi, Hiroshi Morita, Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), “Modeling on Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, Euro Phys. J. E, Vol.20, No.1, 7, May 30, 2006.
- Masato Makino (JST/CREST), Hideaki Koda (Nagoya Univ.) and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Anomalous Orientation of Dipolar Particle in Shear and Magnetic Field”, Journal of the Physical Society of Japan Vol.75, No.6, June 2006, 064714 1-4.
- Hiroshi Morita (JST/CREST), Keiji Tanaka (Kyusyu Univ.), Tisato Kajiyama (Kyusyu Univ.), Toshio Nishi (Tokyo Institute of Technology), Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), “Study of the Glass Transition Temperature of Polymer Surface by Coarse-grained Molecular Dynamics

Simulation”, *Macromolecules*, Vol. 39, No. 18, September 5 2006.

- T. Okuzono (Univ. of Tokyo, JST/CREST), K. Ozawa (Seiko Epson), and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Simple Model of Skin Formation Caused by Solvent Evaporation in Polymer Solutions” *Phys. Rev. Lett.* Vol.97, 136103 (2006).
- Tadashi Kajiya (Univ. of Tokyo), Eisuke Nishitani, Tatsuya Yamaue and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Piling to buckling transition in the drying process of polymer solution drop on substrate having large contact angle”, *Phys. Rev. E* 73, 011601/1-5 (2006).
- K. Ozawa, T. Okuzono, and M. Doi : “Diffusion Process during Drying to Cause the Skin Formation in Polymer Solutions”, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 45, No. 11, pp. 8817-8822 (2006).
- T. Yamaguchi, and M. Doi (Univ. Tokyo CREST-JST): “Debonding dynamics of pressure-sensitive adhesives: 3D model”, *Eur. Phys. J. E* 21, 331 (2006).
- Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata): “Giant Reduction in Dynamic Modulus of κ -Carrageenan Magnetic Gels”, *J. Phys. Chem. B*, 110, pp.20217-20223(2006).
- Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata) : “Rheological Characteristics and Magnetization Effects of Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* 31 [3], pp.807-810(2006).
- Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata): “Developments for A Fluid Pump Using Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* 31 [3] , pp.803-805(2006).
- Takashi Taniguchi (Univ. Yamagata&JST-CREST), Tetsu Mitsumata, Matataka Sugimoto, and Kiyohito Koyama: “Anisotropy in Elastic Modulus of Hydrogel containing Magnetic Particles”, *Physica A*, 370, pp.240-244 (2006).
- Hiroshi Morita (CREST-JST), Haruki Miura (Nagoya Univ.), Masamichi Yamada (Nagoya Univ.), Tetsuo Yamaguchi (Univ. Tokyo CREST-JST), Masao Doi (Univ. Tokyo CREST-JST): “Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-Grafted Polymer Films II -Effect of Grafting Density-”, *Polymer Journal*, 39(1), 73-80 (2007). Publication 15, Jan., 2007.
- Nobuhiko Watari, Makino Masato (Univ. of Tokyo, JST/CREST), Norio Kikuchi, Ronald G. Larson and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Simulation of DNA motion in a microchannel using stochastic rotation dynamics”, *Journal of Chemical Physics* 126,094902 (2007).
- T. Yamaguchi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), K. Koike (Univ. of Tokyo), and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “In-situ Observation of Stereoscopic Shape of Cavities in Soft Adhesives”, *Europhys. Lett.* 77, 64002 (2007).

(2) 特許出願

平成 18 年度特許出願: 0 件 (CREST 研究期間累積件数: 4 件)