

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書

坂上 貴洋

青山学院大学工学部

准教授

高分子物質のトポロジカル構造解析による新規物性の探索と設計

§ 1. 研究成果の概要

環状高分子鎖の顕著な特徴として、系を特徴つけるトポロジカル不変量(分子鎖内結び目、分子間絡み目の様式により決定される)が挙げられる。濃厚溶液では、このトポロジカルな拘束が系の物性を大きく左右することは想像に難くないが、そのメカニズムはよくわかっていない。特に、トポロジカルには最も単純な系(結び目、絡み目無し)は、基礎科学的な観点のみならず、生物(細胞核内の染色体高次構造)、材料開発(新規な絡み合い構造)との関連からも興味深い。本研究では、トポロジー制御による新規物性材料の開拓をも視野に入れ、大規模シミュレーションのデータ解析から、環状高分子鎖濃厚系に内在する本質的な特徴を抜き出すことを目指している。

本年度は、結び目、絡み目無しの濃厚溶液中の環状鎖の運動形態について、特に、鎖間の協働的な運動に着目して解析を行った。シミュレーションの動画を見ると、熱揺らぎの中でランダムに運動している様子しか見えないようであるが、変位相関関数という量の解析より、異なる鎖間に存在する高度な協働性を抜き出すことができた(図1)。同様の解析を線形鎖の絡み合い溶液にも行うことで、線形鎖濃厚系と、トポロジカルな拘束に支配される環状鎖濃厚系とでは、協働運動の様式において、定性的なレベルで大きな差異があることを明らかにした。

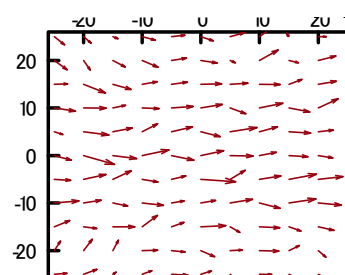


図1)変位相関関数の解析から見えてくる鎖間の協働運動を表すベクトル場

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者:坂上 貴洋 (青山学院大学理工学部 准教授)
- ② 研究項目
 - ・線形高分子鎖濃厚溶液における変位相関関数の解析
 - ・環状高分子鎖濃厚溶液における変位相関関数の解析
 - ・高分子溶液の物性に及ぼすトポロジーの効果の定量化
 - ・環状高分子鎖濃厚溶液のパーシステントホモロジー 解析