

先端研究拠点事業—国際戦略型—
「ソフトマターと情報に関する非平衡ダイナミクス」
共同研究プログラム 派遣報告書

2015 年 2 月 26 日

氏名(ふりがな)	芝 隼人 (しば はやと)
所属機関・部局・専攻内の所属分野	東京大学物性研究所 附属物質設計評価施設
職名	助教
メールアドレス	shiba@issp.u-tokyo.ac.jp
電話番号、FAX	04-7136-3267 / 04-7136-3443

派遣先 1

受け入れ研究者氏名	Gerhard Gompper
所属機関 (国)	ICS2, Forschungszentrum Jülich, Germany
身分	Professor
メールアドレス	g.gompper@fz-juelich.de
研究室 URL	http://www.fz-juelich.de/ics/ics-2/EN/
電話番号、FAX	+49 2461 61-4012 / +49 2461 61-3180

派遣先 2

受け入れ研究者氏名	Jean-Baptiste Fournier
所属機関 (国)	Université Paris Diderot - Paris 7, France
身分	Professor
メールアドレス	jean-baptiste.fournier@univ-paris-diderot.fr
研究室 URL	http://www.msc.univ-paris-diderot.fr/~jbfournier/
電話番号、FAX	+33-1 57 27 62 49

派遣先 3

受け入れ研究者氏名	Roland R Netz
所属機関 (国)	Freie Universität Berlin, Germany
身分	Professor (W3)
メールアドレス	rnetz@physik.fu-berlin.de
研究室 URL	http://www.physik.fu-berlin.de/en/einrichtungen/ag/ag-netz/
電話番号、FAX	+49-30-838 55737 / +49-30-838 53741

共同研究

研究課題名	和文	脂質膜の非線形ゆらぎと構造形成についての数値的研究
	英文	Simulation study on structure formation and nonlinear fluctuation of surfactant membrane
派遣期間	2015年2月9日～2月25日	

実際に行った研究活動、成果などを1-2ページ程度で記述してください。

脂質膜は、その形態のゆらぎに応じて多彩な形状やゆらぎの性質を示す。最近30年余りにわたって、W. Helfrich による曲面の弾性論に基づいた脂質幕の構造とゆらぎについての研究は、多くの発展的な課題をもたらしており、現在ドイツ、フランスを中心とした当該分野の研究人口はそのピークにあると思われる。今回の共同研究プログラムにおける当該派遣の目的は、派遣対象者が行ってきたこれまでの粗視化分子動力学シミュレーションを発展させ、複雑な構造形成とゆらぎの性質の研究の方向性を探り、具体的な成果をもたらすことである。私が今後も関与していく可能性を考えている複数の研究方向に鑑みて、今回は3名のホストのもとへ訪問した。以下では、時系列に沿って、訪問先1、3、2の順序で今回の活動内容について報告するものである。

まず、2月9~11日、20~25日に渡って訪問したドイツ・ユーリヒ研究センターでは、多層脂質膜に剪断流を印加したときに生ずる構造形成やダイナミクスについての私の以前からの共同研究の発展を図った。以前の共同研究において、我々は全く乱雑な状態から自然にグレインが生成されたラメラ相に剪断流を印加したときに、実験で今まで完全には同定されていなかったロール状の中間領域が見られることを明らかにした。由来は現在もはっきりはしていないが、膜密度・剪断率の両者を軸としてとった相図の構造からは、構造欠陥と剪断流の速さの間で競合が見られていることが関係していると推察される。従って、自然な帰結として初期欠陥を埋め込んだ系においてどのような変形が見られるのかを研究することは重要であると考えられる。今回、我々はスクリー欠陥の螺旋符号を様々に配置した多層脂質膜系に対して長時間の剪断流を印加した。その結果、特定の配置のもとでドメインの回転を含む大規模な変形が見られる条件を特定するまでに至った。このように大量の欠陥が含まれることで多層膜構造に対して誘起される変形を研究した実例は先例がないと思われる。論文執筆に向けて、さらに準備を継続したい。

2月12日、13日にはドイツ・ベルリン自由大学物理学科に移り Roland R. Netz 教授を訪問した。氏と面会するのは今回の訪問が初めてとなる。今回の目的は彼らのグループで最近発展が見られている、ギブス相平衡条件を完全に満たしたシミュレーション手法による、水和力の由来の研究、またイオンを伴った表面現象についての進展の経緯と研究の現状を聞くことを目的としている。イオンや水和構造が関与すると、そのミクロな構成要素がもたらすエネルギー変化が熱ゆらぎと比較して莫大であることから、通常研究されているのと質的に全く異なる非平衡状態がもたらされる。これらは物理化学分野において長らく重要な研究対象であったが、これらが生体系において果たしている構造・機能発言における役割を考えると、ダイナミクスの研究を進めることが重要である。今回当該研究室の院生などメンバーと一通り議論を行い、全原子モデルから出発して粗視化描像を得るための試みについていくつもの重要な情報を得ることができた。また、初日の2月12日には、私の以前の粗視化分子模型を用いた研究について、「Simulation of large-scale structure formation in surfactant membranes under flow」というタイトルにより1時間のセミナー発表を行った。

次に2月16日~19日にはフランス・パリ第7大学にて Jean-Baptiste Fournier 教授を訪問した。以前の先端拠点形成事業による派遣にて、我々は脂質膜の残留応力問題と呼ばれる問題を取り上げた。表面張力をかけていない脂質膜面を見ると、その膜面のジオメトリは膜の射影面と実際の面と2つの方向を伴っている。これらの面積を考えに入れれば、表面張力の定義は2通り存在すると考えられる。これらは一部で激しい論争を引き起こしているが、我々はこの問題に対してシミュレーションで決着をつけるべく、2つの張力を用いた拡張アンサンブル内のモンジュ模型の自由エネルギーを定式化した。これにより、双方の張力をコントロールした上で面積と膜の高さをメトロポリス法を用いてモンテカルロ計算できるようになった。今回我々が得た発展は、

これらの揺らぎは分子の大きさなど脂質膜内の最小の長さスケールで定められる最大カットオフ端数で支配されており、これらを考慮に入れると見事な Fourenir 教授の理論結果との一致が得られること、また繰り込まれた表面張力や曲げ弾性率と比較できるめどがついたことである。これらは論争の対象の主な2つの論点に決着をつけるものとなっており、我々は早急にデータをまとめた上で論文執筆に取りかかることを約束した。