

自己紹介

氏名：青村幸典

所属：新領域創成科学研究科 物質系専攻 伊藤・横山研究室

学年：博士2年

研究テーマ

分子シミュレーションを活用した、高分子ゲルの構造物性相関の解明

スキル

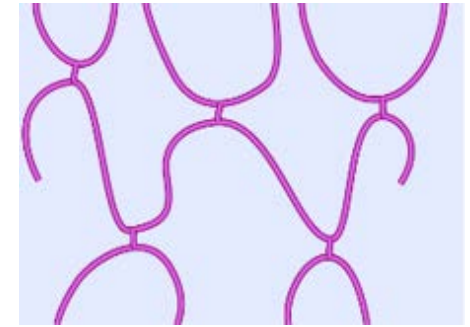
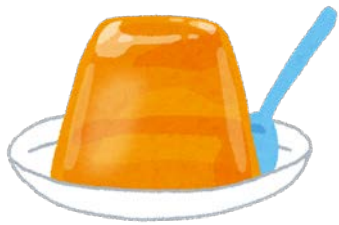
Python（シミュレーションや解析に用いているため）

出身は工学部応用化学科なので、化学がある程度わかります

NMR、**GPC**、**X線散乱**、引張試験など、高分子材料の物性解析のための装置をいくつか取り扱ったことがあります

ハイドロゲル

ハイドロゲル: 高分子網目 + 水
ゼリーやソフトコンタクトレンズなど



水を主成分とするため生体適合性に優れる

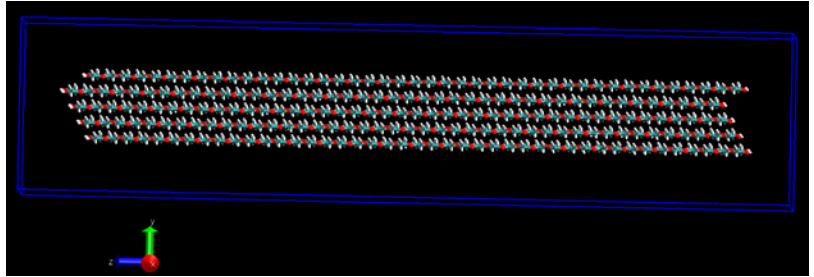
一般的な高分子ゲル：網目が不均一なために、変形に伴う応力が局所に集中して壊れやすい

現在の研究テーマとその概要

①水溶液中の PEG伸長結晶の全原子MDシミュレーション

→伸長したPEG結晶がどのように溶解するか

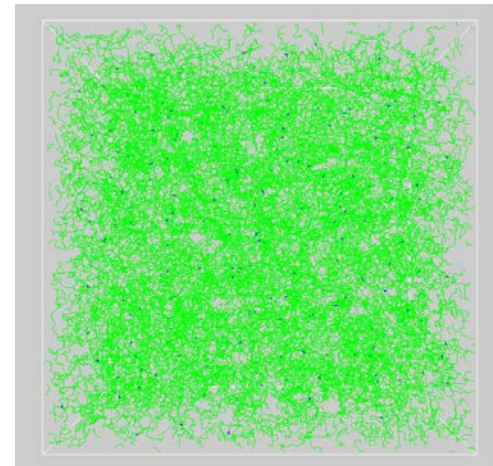
ハイドロゲルにおける伸長誘起結晶化のメカニズムを解明することを目的としたシミュレーション



②Tetraネットワークの粗視化MDシミュレーション

シミュレーション

→高分子網目の構造が力学物性にどのように影響するか

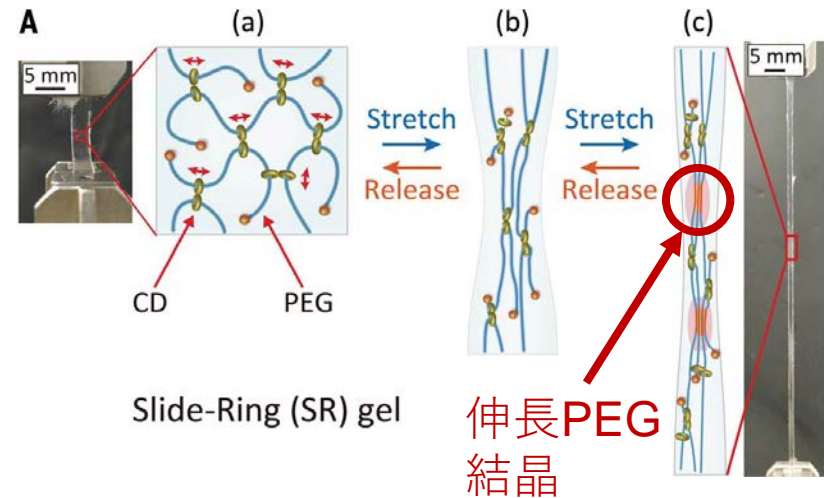


PEG伸長結晶の全原子MDシミュレーション

伸長誘起結晶化

ネットワークの伸長に伴って
高分子鎖が凝集・結晶化する
現象

ゴムの強靱化メカニズムとして
知られているが、ハイドロ
ゲルにおいても発現するこ
とが近年になって確認された



C. Liu et. al., *Science* **372** (2021) 1078-1081.

ハイドロゲルの伸長誘起結晶化において、網目を構成する高分子鎖が
どのようにふるまっているのか？

→**伸長PEG結晶**の全原子モデルを作成、水溶媒中での溶解の様子を
シミュレーション

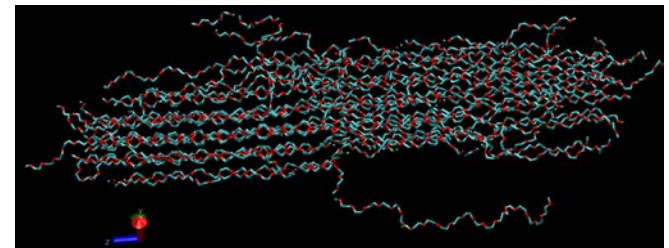
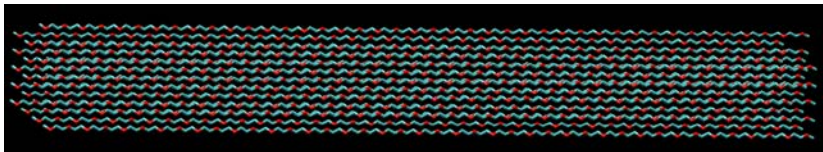
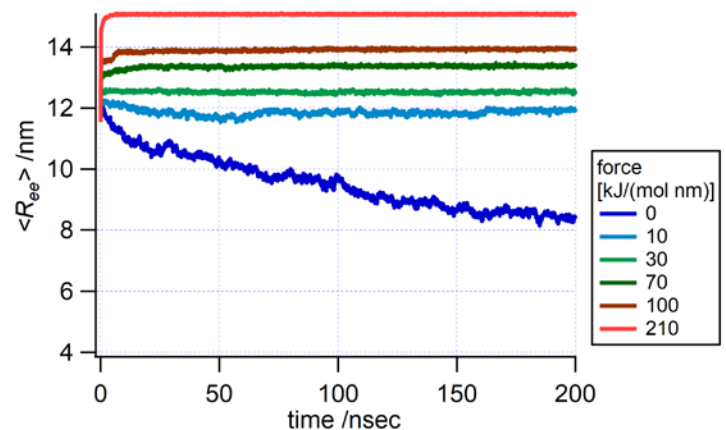
全原子MD: 数 nm, 数百nsまでの振る舞いを追跡可

PEG伸長結晶の全原子MDシミュレーション

先行研究より長さ約10 nmの伸長PEG鎖24本からなる伸長PEG結晶を再現、一定の伸長力をかけて200 nsの全原子MD計算

らせん鎖結晶では力を除いても結晶の解体に時間がかかる（シミュレーションのタイムスケールより長い）様子が見えた。一方、強い力を印加すると比較的速やかに伸び切り鎖結晶へ形態変化する様子が見えた。

伸び切り鎖結晶では、一定の力を印加した時にらせん鎖へ形態変化する様子が見えた。



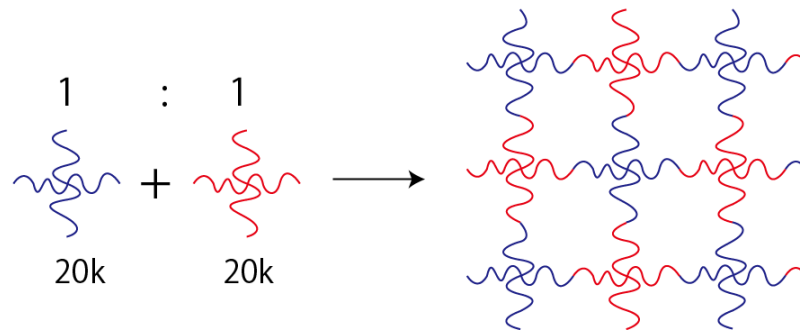
10 kJ/(mol nm),
600 ns

Tetraネットワークの粗視化MDシミュレーション

Tetra-PEGゲル

均一な四分岐網目を持つゲル

分岐点間分子量が均一であり、網目構造が明確なため、**構造と物性の**相関を解析しやすい

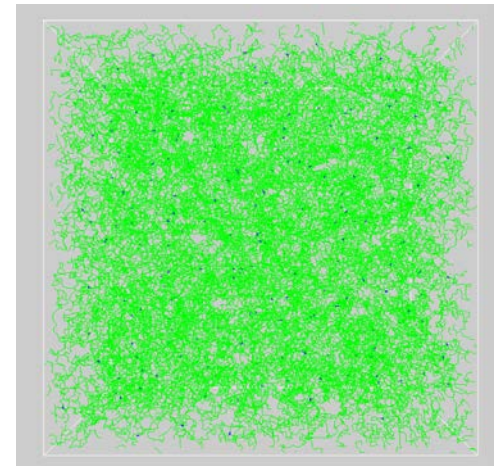


粗視化MDシミュレーション

原子団を一個のビーズに置き換えたモデルでのシミュレーション

化学的性質が捨象されるが、**高分子網目**

(数十nm) スケールでの振る舞いを計算することが可能



Tetraネットワークの粗視化MDシミュレーション

Tetraネットワークについて、分岐点間ビーズ数を変えて伸長シミュレーション

一軸変形に伴う応力-ひずみ特性や高分子網目の変形の様子を解析

分岐点間距離の均一なネットワークであっても変形の様子は均一でなく、伸びる鎖と伸びない鎖に分かれてしまうこと、分岐点間ビーズ数の大きいネットワークの方がより高い配向度を示す様子が見られた。

