

成果報告書

京都工芸繊維大学 工芸科学研究科

博士後期課程 設計工学専攻 2年

池田 高浩

会議名: The 38th Conference of the European Colloid & Interface Society (ECIS2024)

開催地: コペンハーゲン, デンマーク

開催期間: 2024/09/01 ~ 2024/09/06

発表題目: Self-assembly of amphiphilic cubes in a nanoslit under shear flow

1. The 38th Conference of the European Colloid & Interface Society について

Conference of the European Colloid & Interface Society (以下 ECIS) はコロイド界面科学における最先端のトピックを扱い、参加者は毎回 400~500 人に上る、当該分野で最大規模の国際会議である。本学会はコロイドの自己集合構造や、レオロジー、界面制御、生体高分子やゲル、相転移現象など幅広い分野を網羅しており、研究者の関心も高く、活気あふれる学会である。

2. 研究発表の概要

本学会では、”Self-assembly of amphiphilic cubes in a nanoslit under shear flow” という題目でポスター発表を行った。本研究は、表面異方性をもつ立方体ナノ粒子がナノスケールの狭小な平行平板間の中で形成する集合構造と、せん断流れ場による構造の変化を、粗視化分子動力学法の一つである多粒子衝突動力学法 (Multi-Particle Collision Dynamics, MPCD) を用いて明らかにしたものである。立方体ナノ粒子は最も単純な異方的形状を持ち、コロイド結晶への応用について盛んに研究されている。一方で、粒子表面に異種材料を修飾したナノ粒子 (“パッチ粒子”)により、等方的粒子では実現できない自己集合構造と物理的性質をもつ新規材料を開発する試みも行われている。これまでの研究で、異方性立方体パッチ粒子の集合構造と粘性挙動が明らかにされてきた。しかしながら、ナノ空間中の自己集合構造はほとんど明らかにされていない。水やコロイド懸濁液はナノ空間中では特異な挙動を示すことが報告されていることから、パッチ粒子においても、固体壁面との相互作用のもとで形成する自己集合構造を理解することは応用上極めて重要である。そこで、本研究は異方性立方体パッチ粒子の懸濁液をスリットに閉じ込め、パッチの配置、スリットの幅、およびせん断速度に応じて集合構造がどのように変化するかを、GPU 上で動作するシミュレータ HOOMD-blue を用いてシミュレートした。計算の結果、平衡状態では、ロッド型のクラスターはスリット幅が狭くなるにつれてサイズが増加する一方、ジグザグ型のクラスターはロッド型よりもサイズが小さく、スリット幅によらずほとんど変化しないことを見出した。また、せん断速度を与えた場合、ロッド型のクラスターはフラクタル型よりも大きなサイズを維持する一方で、クラスターが崩壊し始める臨界せん断速度は両者ともほとんど同じであると

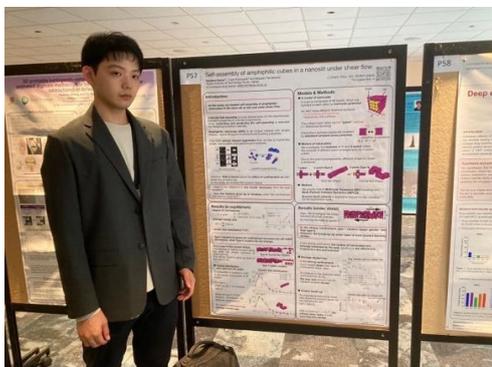
いう結果が得られた。本研究の詳細については、*J. Chem. Phys.* **161**, 024901 (2024) を参照されたい。

3. 会議の成果と今後の展望

学会の二日目 (9/2) および三日目 (9/3) にポスターセッションが行われ、私は二日目に発表を行った。発表直前に他のポスターを見渡してみたところ、ほとんどが実験的研究であり、数値シミュレーションに関する研究は私を含め僅かであった。聴きに来てくれた方の多くは主に実験を主体とした研究者であり、計算手法、モデルの妥当性について多くの質問・コメントをいただき、数値シミュレーションモデルの物理的な意味について改めて考える機会となり大変有意義であった。またセッション中に、今回使用した MPCD 法の研究者の方とも直接議論することができた。MPCD 法を用いた研究は分子シミュレーションの中でも珍しいため、ポスターセッション終了後も、MPCD を用いた新しいシミュレーション手法に関して貴重な意見を聞くことができ、大いに刺激となった。ポスターセッション以外の時間でも、複数の研究者と議論を交わし、現在進めている研究に関する有意義なアドバイスやコメントをいただき、新しい着眼点を得ることができた。今後は、実験分野の知見についてもさらに理解を深めるとともに、本学会で取り上げられた様々な研究課題・テーマについても積極的に知識を深め、私自身の研究分野の裾野をさらに広げられるように取り組んでいきたい。

4. 最後に

本学会は私がこれまで参加した中では最大規模の、かつ伝統ある学会であり、そのような場で自らの研究成果を発表し、様々な研究者と意見交換ができたことはとても有意義であったと実感しています。また、世界の第一線で活躍される研究者の講演や、セッション後の交流や議論を通して、彼らが何に注目して、そしてどのようなアプローチで研究に取り組んでいるのかを直に知ることができました。これらの経験は、今後の研究を進めるうえで大いに刺激となりました。最後に、日本伝熱学会関西支部様からのご支援により、本会議に参加・発表し有益な議論を交わすことができました。心より感謝申し上げます。



発表したポスター



ポスター会場の様子