

# 繊維高分子材料研究室

## 原子・分子レベルのシミュレーションで多種多様な現象のメカニズムを解明



水口 朋子 准教授  
[材料化学系]

### [経歴]

2010年04月- 日本学術振興会特別研究員  
2012年04月- 分子科学研究所 特任研究員  
2014年04月- 大阪大学 特任研究員  
2014年07月- 名古屋大学 研究員  
2015年03月- 京都工芸繊維大学 助教  
2020年03月- 京都工芸繊維大学 准教授

### [研究分野]

ソフトマター物理、計算科学、化学物理

### 研究室探訪

### 繊維高分子材料研究室

### [研究概要]

主に分子動力学法を用いて、シミュレーション研究を行っています。シミュレーションのテーマは、ガラス転移やその関連現象のメカニズム解明、細孔中の水の構造とダイナミクスに対する界面の影響の検証など多岐にわたります。

この世にあるものすべての構成要素である原子・分子。あらゆる現象にも原子・分子の挙動が関係しています。繊維高分子材料研究室の水口先生は、そうしたマイクロな世界に光を当て物事の裏にある法則を見抜く研究に挑んでいます。

### 未解明の現象

#### 「ガラス転移」の謎に迫る

窓ガラスや食器のグラスなど、私たちの身の回りで当たり前のように使われている「ガラス」。ガラスは液体が冷え固まってできる、ということはよく知られていますが、なぜそのような現象が起こるのか、そのメカニズムは理論的には解明されていません。このように、身近にあるにもかかわらず未解明となっている現象は多数存在しており、多くの研究者が真理にたどり着こうと精魂を傾けています。繊維高分子材料研究室の水口先生も、そんな未解決問題に惹かれた研究者の一人。大学院時代からガラスの性質に関する研究に取り組んできたといいます。「複雑な現象やシステムの裏にどのような法則が隠れているのか、それを知ることに興味がありました。そこで出会ったのが『統計力学』という分野でした。統計力学とは、原子や分子などマイクロな世界に対する理解を通して、マクロな世界で起きている現象について説明しようとする、物理学の一分野です。「統計力学で扱うメジャーなテーマとして、液体がガラス状の固体になる『ガラス転移』の現象があったのです。そうした経緯で、この研究に取り組むようになりました」と水口先生は話します。

先生が研究に用いているのが「分子動力学法」と呼ばれるコンピュータシミュレーション手法です。「分子動力学法は、原子や分子の間に働く力、相互作用を仮定し、運動方程式を解いていくことで原子・分子の物理的な動きをシミュレーションする方法です」と水口先生。シミュレーションにはLAMMPSやNAMDというソフトウェアを使用。解析にはプログラミングの知識も必要で、学生はつまづきながらも、手を動かす中で少しずつ習熟していくそうです。

ガラス転移のメカニズム解明に向けて、どのように研究は進んでいるのでしょうか。「実用されているガラスは複雑な構造を持ち、原子・分子間でも複雑な相互作用が起こっています。成分が多い複雑な物質の方が、ガラス化しやすいという特性があるのです。しかし、私の行ったシミュレーションでは、まずは単純なモデルでガラス化の様子を調べていきました。その成果として、どのような物質でもガラスになり得ることが見いだされました。また、ガラス化は『結晶化』と

いう現象が阻害されて起こるのですが、その結晶化のメカニズムは、高温の場合と低温の場合で違いを判別しました。最近では、シミュレーションだけでなく、実験でも単純な物質をガラス化できるという例が出てきています。実験とシミュレーションの比較がしやすくなるので、メカニズムの解明に向けてさらに一歩近づけるかもしれません。もしその本質を明らかにできれば、ガラスの脆さや安定性のコントロールにつなげていけると考えています」

### 好奇心に導かれて

#### 様々なテーマに挑戦

ガラス転移の他にも、水口先生は分子動力学法を用いて多様なテーマに取り組んでいます。「これまでは、生体分子を対象としたシミュレーションも行ってきました。細胞内におけるタンパク質の凝集について調べるといいます。もともと私は生命体の機能にも関心がありました。かつては生命現象に対しては物理学的なアプローチが取りづらかったのですが、ここ15年ほどでそうした研究が盛んになってきました。原子レベルでシミュレーションを行うと、実験では見えない現象も見えてきます。そこが面白い点ですね」と水口先生。「同じく生体分子に関するものとしては、DNAの構造についてのシミュレーションも実施しています。本学の別の研究室に、DNAを用いて繊維をつくらうとされている先生がおり、その方からの相談でこのテーマに取り組み始めました。DNA繊維の引っ張る力に対しての脆さはどのような要因によって決定されているのか、といった検証から始まり、現在では塩基配列による安定性の違いや、その原因について調べています」

また、最近ではセラミックス材料の表面で起こる反応についても研究しているといいます。「セラミックスは人工関節や歯科用インプラントなどの材料として使われていますが、使用しているうちに摩耗が起こってきます。そして摩耗が進むと、インプラント材料を交換する必要が出てきてしまうのです。界面でどのような反応が起こっているのかをシミュレーションで明らかにできれば、それを踏まえて反応が起きにくいような表面デザインを施し、材料を長持ちさせるといった対策が可能になると考えられます」。この研究は、デザインセン



Fig.1——シミュレーションで得られたDNAの構造を可視化



Fig.2——新たな分子モデルについて説明する

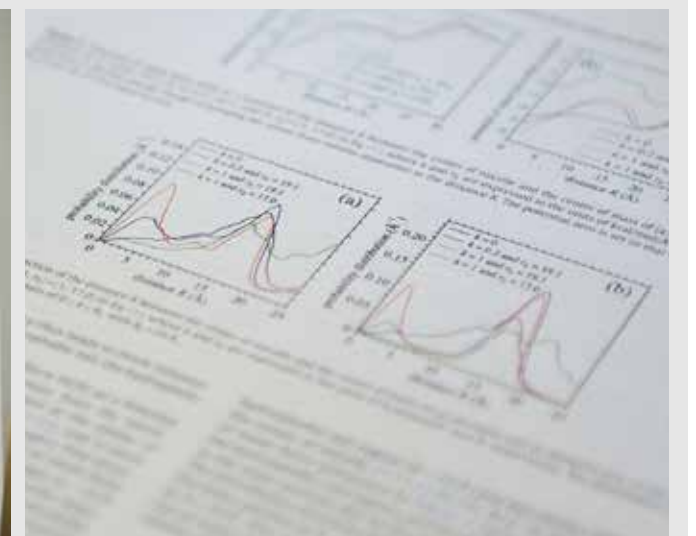


Fig.3——界面活性剤ミセルに関する研究成果

トリックエンジニアリングプログラム (dCEP) のセッション「計算機シミュレーションに基づく表面の分子デザイン—歯科用材料への応用を目指して」と連動して進められています。

「分子動力学法という手法を持っていれば、様々な物質や現象を研究対象とできるのがこの分野の魅力です」と語る水口先生。学会で話を聞いたり、他の研究室の先生から聞いたりして面白いと感じたテーマがあれば、どんどん挑戦していくそうです。「一人で考えていると、想像できる範囲に限られてきます。研究のアイデアは議論の中で生まれてくることが多いですね。実

際に、そうした他の研究者との交流から多くの共同研究が生まれているといいます。

### 社会性の高い研究に より力を注いでいきたい

最後に、研究に懸ける思いについて伺ったところ、水口先生はこう話してくれました。「研究を始めた頃は、一番のモチベーションとして『現象の裏にある法則を知りたい』という気持ちがありました。しかし、色々具体的な問題に当たり、多くの研究者の方々と接するうちに、研究成果

を社会に還元していければよいな、という意識が強くなってきました。セラミックスの摩耗の問題は、まさに社会のためになるテーマの一つです。またタンパク質の研究にしても、現在はアミロイド繊維と呼ばれる、アルツハイマー病などの原因となるタンパク質凝集体について調べています。そのメカニズムを解明できれば、病気の予防につながられるかもしれない。そうした点に大きなやりがいを感じています。様々な社会課題に対して、自分の持つスキルを生かしてどのようにアプローチできるかを考え続けていきたいと思っています」