

## これまでの研究成果

液晶、コロイド、高分子といった物質群は、その内包するメゾ構造（濡れ、電気二重層、位相欠陥、絡み合い）のため、やわらかい力学物性を示し、ソフトマターと呼ばれている。ソフトマターは他の系には見られない、極めてソフトな弾性、遅い緩和を示し、重要な材料として用いられているだけでなく、小さな外場の変化によって容易に非線形・非平衡状態、相転移を引き起こすという点で、基礎物理にとっても興味深い対象である。また近年、生体物質のダイナミクスを、エネルギーを消費して自ら動きを作り出すという意味で”アクティブ”なソフトマターとして研究することも盛んに行われている。

私は、これまでソフトマターで見られる現象のうち、主に、(1)相転移現象、(2)アクティブなソフトマターのダイナミクスの研究を行ってきた。研究手法は、連続体方程式の理論的、数値的な解析である。このような手法は、よりミクロな詳細に依存した結果が必要な場合には、分子動力学法等により補われる必要はあるものの、ソフトマターのメゾスケールでの物理描像を見通しよく得るのに適したものだと考えている。

## 1. 相転移現象の研究

### 選択的溶媒和効果を持つイオンで構成された電気二重層に関する新しい表面相転移

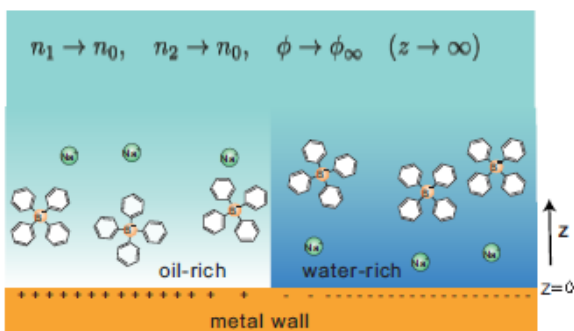


図1：表面電荷の総量が一定の境界条件では、壁付近で異なった構造の電気二重層が横方向に共存する事で電荷の関与する相分離パターンが発生する。

生体など、イオンと溶媒の相互作用が重要な系は数多い。一般には水などの高い極性溶媒中では、陽イオン、陰イオンの溶媒和の違いの効果が存在している。我々は、このような系の中で最も簡単な例の一つとしてイオンを含む、水油二元混合系の金属壁付近の振る舞いを研究した。その結果、表面電荷の関与する新しい表面相転移を発見し、ある平均表面電荷密度の範囲では、壁面上の一樣状態が不安定になり、左図のように**二つの異なる電気二重層が相共存**することを示した。さらに、我々はこの現象がこれまで知られていない新しい**表面相転移現象**の帰結として理解できることも示した。この研究は、相転移理論からの興味のみならず、

コロイドの安定性に重要である電気二重層の研究に新しい局面を切り開く結果であると考えている (S. Yabunaka and A. Onuki, *Physical Review Letters* **119**, 118001 (2017).)。

### O(N)模型の新しい臨界現象

相転移理論の基礎的な方面にも関心を持ち、パリ第6大学のBertrand Delamotte博士とともに非摂動繰り込み群理論により、O(N)対称性を持つもっとも単純な相転移現象の模型を調べた。その結果、摂動的繰り込み群では記述できないいくつかの多重臨界点を発見した。この結果は、相転移理論からの興味のみならず、摂動的繰り込み群で記述できないような場の理論の非摂動的な現象の理解に基本的な役割を果たすと期待される[S. Yabunaka and B. Delamotte, *Phys. Rev. Lett.* **119** (19), 191602 (2017).]。

## 臨界吸着のプロファイルの計算

臨界点に非常に近い気液系や2元混合系などが境界と接している場合、どちらかの成分が非常に強く選択的に境界に吸着される。我々は、臨界揺らぎの効果を局所的に取り込んだLocal renormalized functional theory(R. Okamoto and A. Onuki JCP 2012)を用いて、3次元空間中での球（コロイド粒子に対応）や無限に長い円柱の周りの吸着のプロファイルを計算した[S. Yabunaka and A. Onuki, Physical Review E 96 (3), 032127 (2017). ]。

## 2. アクティブソフトマターのダイナミクスの研究

### 界面によって駆動される化学反応下での液滴の自発運動

近年、細胞運動や、魚や鳥の群れに見られる協同運動など外力無しに自ら動きを作り出すシステムが非平衡物理の一つの大きなトピックとなっている。その流れから新しいソフトマター物理の対象として、非平衡環境下で自発的に空間対称性を破り、自己推進運動をする液滴、ベシクルなどが盛んに研究されている。しかし、本研究の開始時点では、このような系の理論的取り扱いでは、流体力学的モデルから出発した自己推進する物体（特に液滴）の運動方程式の導出は存在しなかった。

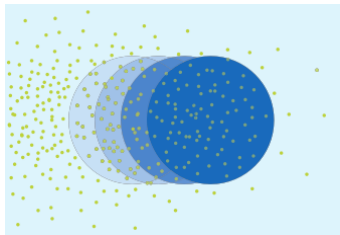


図2：自己推進する液滴のモデル。

我々は、以下のような流体力学モデルを構築した：「左図に示すような二成分混合系（相分離が起こる場合）にさらに希薄な第三成分が添加されている状況を考える。またさらに、希薄な第三成分以外の二成分のうち一方の成分が多い相からなる液滴がただ一つ存在する場合を考える。第三成分は(1)液滴の内側で生成され、(2)あらゆる場所で一定のレートで分解され、(3)第三成分の界面上での濃度によって界面張力が変化する効果（マランゴニ効果）を仮定する。」

このようなモデルに対し、流体中の自己推進粒子の運動方程式を解析的に導出し、化学反応のレートを変化させる事により、静止状態から有限速度での並進運動状態への解の分岐が起こる事を我々は、初めて理論的に示した[S. Yabunaka, N. Yoshinaga and T. Ohta, J. Chem. Phys. 136, 074904 (2012)]。また最近、二体の液滴の衝突のダイナミクスを数値計算、解析計算の両面から調べ、正面衝突の場合、分岐点からの距離が近い場合は弾性衝突し、遠い場合には液滴の融合が起こる事を示した [ S. Yabunaka and N. Yoshinaga, Journal of Fluid Mechanics, 806, 205-233 (2016). ]。

### 増殖する細胞組織の連続体理論

細胞（数10ミクロン）よりも大きなスケールにおいて、生体組織を連続体として見た場合、以下のような特徴を持つ。 (a)エネルギー消費を伴うアクティブなストレス（収縮力）を発生、(b)細胞の運動、(c) ((a)(b)の要素と関わる) 細胞極性、細胞の配置、変形などの異方性、(d)細胞増殖と細胞死。このようなアクティブ（エネルギーを消費しながら動き増殖も行う）な“ソフトマター”がどのような性質を持つかを解明することは、基礎学術的に重要であるばかりではなく、in vitroでの器官形成の制御、傷の治癒、癌の治療など医療応用の観点からも大変重要である。

私は、アクティブ流体の枠組み (Kruse et al, PRL (2004)) を細胞組織に対し適用することで、1次元の単純な状況で、(a)-(d)のうち、細胞変形以外の要素、特に、細胞増殖、細胞極性、自発運動を考慮した連続体方程式を構築した。

我々は、この方程式の具体的な応用として、組織の伸長過程を考え、その速度を計算した。その結果、細胞増殖と組織内部の応力の結合が、組織の伸長速度に大きな影響を与えうることを示した。また伸長中の上皮細胞組織(MDCK細胞)に関する様々なin vitroの実験で、自発的に密度分布が不均一となり、その不均一性が密度波として伝播することが観測されている(X. Serra-Picamal et al, Nat. Phys. 2012など)。我々は、方程式の中に含まれる、化学エネルギーの消費に伴う寄与 (実際の細胞組織では、組織の自発的な収縮などのATPを消費する過程に対応) が十分大きな場合に数値シミュレーションを行い、進行波が実際に発生することを示した[S. Yabunaka and P. Marcq, Softmatter 13 (39) 7046 (2017), Phys. Rev. E 96, 022406 (2017)]。

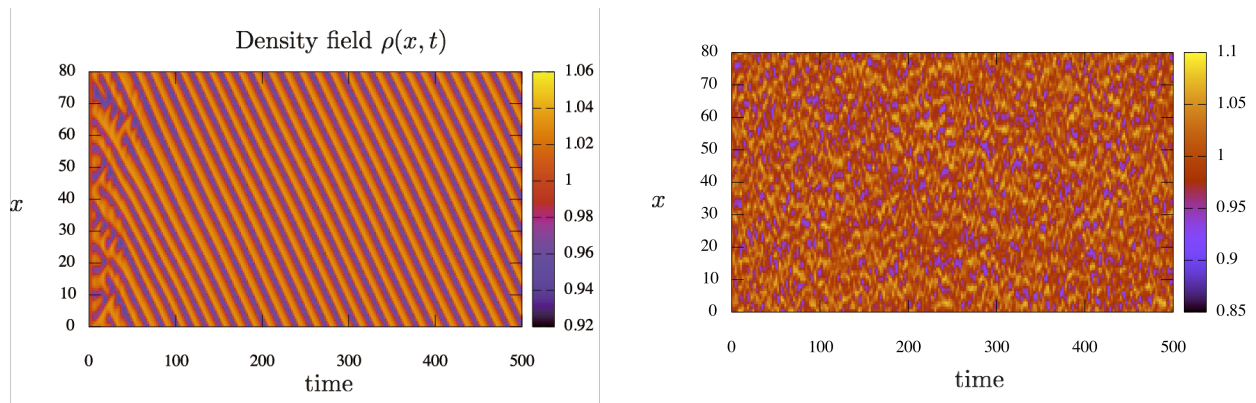


図3：進行波のパターン（左）、より化学エネルギーの消費が多い場合に現れるカオス的なパターン（右）