

[8] 研究室だより「名古屋大学物質科学専攻レオロジー物理工学研究グループ」

名古屋大学大学院物質科学専攻
増渕雄一 mas@mp.pse.nagoya-u.ac.jp

1. 研究室の概要

我々は名古屋大学大学院工学研究科物質科学専攻においてソフトマター研究を行なっているグループです[1]. 図 1 に研究室での研究の概念図を示します.

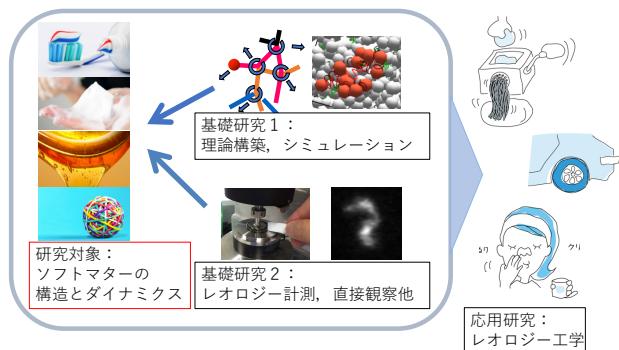


図 1 研究の概念図

我々のグループでは理論、実験、計算と 3 つの異なる手法での研究を展開しています。このためシミュレーションをやっている学生は多くありません。メンバーは、本稿が掲載される時点において、増渕（教授）、畠山（准教授）、山本（助教）がスタッフとして在籍しています。博士課程の学生はおらず、修士の学生が 7 名、学部学生が 5 名、所属しています。

計算環境としては自前のクラスターを主に使っており、コア数は 300 くらいで、小さいものです。後述しますが大きな計算は志向していません。ただし増渕個人としては民間企業との共同研究で神戸の京コンピュータも使っています[2]。また畠山は GPU を利用した計算技術開発も行なっています[3]。

実験も行なっているグループであるため、スペースの大半は実験装置に割り振られています。名前の通りレオロジーを主たるテーマとする部屋なので、レオロジー測定をするレオメーターは 2 台ある他、引張試験機、熱分析装置もあります。また試料を準備するため、化学的な操作が可能なドラフトチャンバーやロータリエバポレーター、合成した高分子を解析分取するためのゲルクロマトグラフィー、動的光散乱装置もあります。また、レオロジーの一つの侧面としてブラウン運動の解析があるため、DNA などのブラウン運動を直接観察するための蛍光顕微鏡もあります。

増渕は今でも自分自身でプログラムを書き、自分で走らせて結果をまとめて論文を書いて、発表もします[4]。（様々な用務の合間を縫ってプログラムを書いたりバグをとったりするのは、もはや苦痛でもなんでもなく、むしろ瘾しだったりします。多少マズっぽいですが教授、准教授の先生方にはご理解いただける感覚ではないでしょうか。）このため学会ではシミュレーションの話をしていることが多いので、増渕はシミュレーションの人という印象を持たれてしまいます。しかし上述のように研究室の資源は実験側に大きく振られています。このようになっている理由はいくつかありますが、一つは研究室にくる学生さんの多くが実験を志向されることにあります。もう一つは、ソフトマター研究に特有の事情のためですが、これは自分ではソフトマター研究の根幹に関わる事柄だと思うので章を分けて後ろに記します。

2. 研究室の歴史と昔の話

我々のグループは 2015 年に新たに設置されたものですが、名古屋大学工学部の物理系学科におけるソフトマター研究の流れを引き継ぐもの、と自称しています。源流は線形応答理論で著名な中野藤生先生が 1965 年に名大工学部に移籍された際に建てられたグループまで遡ってよいと思います。同グループは工学部応用物理学科にありました。工学部全体に力学の講義を配当する役割を担っており、工業

力学講座（通称コウリキ）と呼ばれていました。同グループに土井正男先生が 1989 年に東京都立大学から教授として着任されました。改組等々ありましたが、土井先生が 2004 年に東大に移られるまでコウリキは存続していました。土井先生の後は（直接講座を引き継いではおられませんが）生物物理分野で著名な篠井理生先生が 2006 年から研究室を置かれています。そのような中、工学部の改組に伴い、我々のグループを全く新しく 2015 年に加えていただきました。筆者は土井先生が名大で出された博士の最初の一人で、卒業したところに戻していただいたわけなので、昔の流れを継承する者と僭称しています。

少し昔の話をさせてください。筆者の同級生は慶應大学の泰岡先生です。また、当時の土井研の助手は京大の松本充弘先生でした。いずれも、分子シム研究会では大変ご活躍の、泣く子もだまる偉大な先生方です。学生当時、泰岡先生と筆者が研究室のワークステーション類のスーパーユーザーでした。泰岡先生が主には UNIX 関係、筆者は Macintosh 関係でしたが、今は懐かしい CAP やら AppleTalk やらを使って相互に連携させていたものでした。当時は確にツールもなく、ネットも黎明期で検索エンジンもありません。そこで松本先生が揃えてくださったオンラインリリーのいわゆる動物本を漁ったり、README.txt の英語を頑張って解読したりしたものでした。また Sun やら HP やら SGI やらが混在するヘテロな環境で、当時は UNIX といつても各メーカーが勝手な OS を搭載していたので、互換性をとるのも大変でした。今から考えればそのときの経験はとても大きな財産になっており、研究室のクラスターのスーパーユーザーは自分だったりします。最新のワザに知識が追いついていないわけですが、とりあえず、自分のプログラムを走らせるに必要な、最低の環境構築と管理ができるスキルがあるのはありがたいことです。このおかげで大学を転々とする間も安いパソコンクラスターで結果を出し論文を書き続けポストを得られました。でも本当は松本先生を見習って、何も知らない学生さんにとりあえず任せて勉強してもらうのが良いのだと思います。

3. 研究内容：計算だけにしない（できない）理由

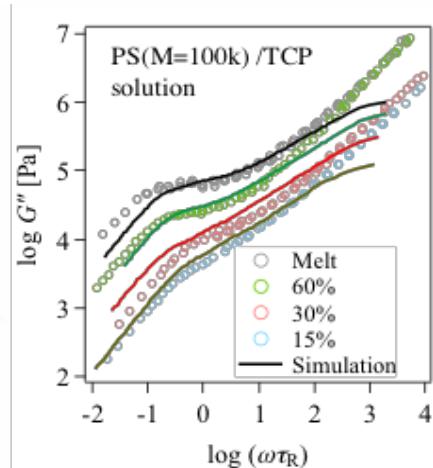
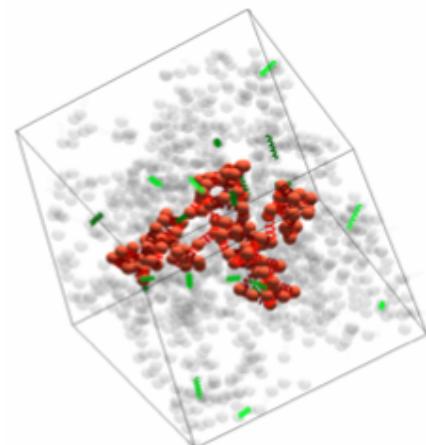


図 2 高分子溶液の挙動を予測するシミュレーションのスナップショットと粘弾性予測

我々の研究はレオロジー、すなわちソフトマターの構造とダイナミクスです。ソフトマターは高分子、ゲル、泡など、分子量が大きい分子や、多数の分子が集まった分子集合体がその性質を支配する系です。

このような系を理論的、計算科学的に扱う場合の有力な手段が粗視化モデリングです。粗視化とは系の自由度から重要なものを選び出し、その自由度の支配方程式により系の挙動を記述しようとする考え方です。例えば高校でボールの放物運動を考えると、ボールを構成する原子それぞれの位置の変化は考えません。ボールの重心位置の運動だけを考えます。ソフトマターの場合でも、それが示す物性や現象のある部分は、自由度の選び方をうまくすれば記述できるのではないか、というのが粗視化モデリン

グの期待です。図 2 に例として増渕が開発している高分子の粗視化モデルによるスナップショットと、そのモデルで得られた高分子溶液の粘弾性の予測結果を示します[5]。この例では粗視化が“たまたま”うまくいって、高分子の運動が記述できています。計算コストは通常の分子シミュレーションに比べると非常に低いものになります。

粗視化モデリングには、あまり頗る語られないものの、重要な仮定が潜んでいます。すなわち、選ばれなかった自由度は系の本質的な挙動に影響しないこと、いいかえれば、選ばれなかった自由度に対して系の挙動が普遍的であること、を仮定します。この仮定を正当化するには、全ての自由度を考慮したときどうなるかを確認するしか方法がありません。よって実験をするか、あるいは大規模全原子計算をするしか方法がありません。粗視化における自由度の選び方の良し悪しを決める手法が知られていないからです。

このような粗視化モデリングにおける背景から、ソフトマター研究では常に実験と計算/理論の整合性を確認する必要があります。また、面白い実験結果に刺激されながらモデリングをすすめたり、逆にモデルをつくることで必要な実験をデザインできたりもします。増渕自身が、卒研と修論では実験をやり、D 論ではその実験を解析する粗視化計算をしました。三つ子の魂百まで、ということです。

現在我々のグループで進めている研究をご覧いただるために、2018 年 1 月に研究室総出で参加した国際会議における学生さんたちの発表タイトルを列挙します。実験/理論/計算についても示します。

- “Theory of foam stabilization by gel-like complexes” (理論)
- “Effects of inter-segment interactions on normal modes of unentangled polymers” (計算)
- “Monte Carlo simulations of critical gelation for polymers with different molecular weights” (実験+計算)

- “Transitions between lubrication modes of gels induced by negative normal stress” (実験+理論)
- “Linear viscoelasticity of polystyrene melts containing nano-particles” (実験+理論)
- “Clogging mechanism of colloidal particles through a single pore” (理論+実験)
- “Elastic modulus of fiber composites with oriented fibers” (実験+理論)
- “Effects of flexibility on the motion of active particles” (計算)

図 3 に当該国際会議への参加メンバーの写真を載せます。



図 3 国際会議 IWEAYR-13 (济州島) での研究室メンバーの写真

教員は学生とは別に各自のテーマを持って自分で研究しています。例えば増渕は高分子ダイナミクスの粗視化モデリングとシミュレーションコード開発を長年行なっています[6, 7]。図 2 はその成果の一つです。

学生が行う基礎研究とは別にレオロジーの工学的な応用研究も行なっています。レオロジーは地味ですが必ず必要な学問であるため、それなりに需要はあります。住友ゴム、太陽化学、HASL、花王と共同研究を実施中のほか、トヨタ自動車、本田技研、ブリヂストン、東亞合成、住友化学、三井化学、三菱化学、東レ、東洋紡、東ソー、ダンロップスポーツ、日清紡、などと実施経験があります。国のプロジェクトとしては NEDO 産業研究助成、JST さきがけ、内閣府 SIP、科研費基盤 A, B, C などを受けてきて

ます。国際共同研究も多数行なっており、ナポリ大学、ダルムシュタット工科大学、中国科学院、北京航空航天大学、ルーベンカソリック大学、等々と共に著論文があります。

レオロジーはだんだん成熟してきた学問ではありますが基礎学問としての重要性はまだ衰えていないと信じています。ノーベル賞が与れることはないが、研究費がゼロになることもない学問です。レオロジーそのものの面白さについて語り出すと増渕は止まらなくなるので、著書に譲ります[9]。また、増渕は研究室の web ページ[1]にブログを執筆しており、最近のニュースでレオロジー関係の面白い話が出たら取り上げたりしています。

4. 研究室運営

本当は上記の 3まで筆を置くべきだと思うのですが、若干ページ数があるのと企画編集委員の荒井先生のご用命により、研究室の運営についても記します。増渕は異なる教授の先生方 3名にお仕えしたことがあり、また更地に研究室を 2回立てたことがあるという、非常に恵まれた経験をしています。そのような試行を経てもなお、研究室運営の最適解はわかりません。

我々のグループのポリシーは多分、物理系と化学系の中間から物理寄り、という辺りではないかと自分では思います。増渕自身は物理系の出身ですが、化学系の学科や研究所も 10 年以上経験しました。このような経験から見ると、化学系では組織としての一体感を重視する方向、物理系では個々の活動を重視する方向にあるように思います。このような違いは、安全管理にかかる手間、実験装置および試料管理の自由度、習得すべき手技や技能、などにおける分野間の差異から生じているもので、どちらが良い悪いということはないと思います。

我々のグループの物理寄りかなと思う部分は、1) 個々の学生に独立のテーマを配当する、2) 配当後の進め方は自主性に任せ学生のテーマを無理に論文化しない、3) 教員も自分で研究し論文や研究費の

応募は自分の研究で出す、4) コアタイムなし、という辺りです。

一方で化学寄りかなと思う部分は、5) 学生に研究室に毎日出てくることを課し昼食を全員でとる、6) 夏休み/冬休み/春休みの期間を明示する、7) 年 2 回の国内学会発表と年 1 回の国際会議発表を基本的に義務付ける、8) 学会発表の練習やポスターの改訂を教員が何度もみる、9) 個々の学生との個人面談の機会を定期的に設定する、という辺りです。

また、物理/化学を問わず今はどこの部屋でもそうだと思いますが、研究ノートをつけることは実質強制でお願いしています。研究ノートは修論や卒論とともに保管します。

我々のグループのポリシーがベストかどうかはもちろんわかりません。基本的には、学生さんには（我々と同じく）できるだけ自由に研究を楽しんで欲しいと思っています。しかし、研究を開始し継続し仕上げていくのは、経験を積んでからでないと容易ではありません。このときに「言われなくても察しろよ」的な事柄はできるだけ排除しないとお互いに不幸だと思います。これらを明示的なルールにしたら上記のようになった、というのが現状です。

周りの研究室と違うかな、と思うのは国際会議発表です。増渕はアジア各国のレオロジー関係の研究グループで作るネットワークに参加しており、当該ネットワークが毎年開催する国際学生ワークショップにも関与しています。このワークショップは学生のみが発表をし、学生同士の交流を主目的としたユニークなものです。例年 1 月か 2 月に行われるため、我々のグループでは B4 も含め学生全員を派遣します。“卒研発表の前に国際会議発表をさせる”ということになるので、楽に卒業がしたいと考えている人たちには敬遠されているかなと思います。

5. 最後に宣伝：入試などの情報

我々の研究室は工学研究科の物質科学専攻[9]に所属しています。英語の専攻名である Materials Physics Department の方が実態をよく表しており、物理系の研究室が集まっています。大学院修士課程（正確に

は博士前期課程) の入試も物理の問題で、力学、応用数学、電磁気学、量子力学、統計力学、などが出題されます。物理系の研究室の学部生の方でご関心があれば是非ご連絡ください。一方、博士課程については、受験生の修士までの経歴に一定の配慮がなされた入試が行われます。ご興味がおありの方はご連絡ください。よろしくお願ひします。

参考文献

- [1] 研究室 web サイト <http://rheology.jp/nagoya/>
- [2] 平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞(開発部門) 「SPring-8・J-PARC・京の連携と先進タイヤ開発」、住友ゴム工業と共に受賞
- [3] T. Uneyama, *Nihon Reoroji-Gakkaishi*, **39**, 135 (2011).
- [4] 最近では Y. Masubuchi, A. Pandey, Y. Amamoto and T. Uneyama, *J. Chem. Phys.*, **147**, 184903 (2017). など
- [5] Y. Masubuchi, M. Langeloth, M. C. Böhm, T. Inoue, and F. Müller-Plathe, *Macromolecules*, **49**, 9186 (2016).
- [6] Y. Masubuchi, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.*, **5**, 11 (2014)
- [7] Y. Masubuchi, Molecular Modeling for Polymer Rheology, Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, Elsevier (2016).
- [8] 増渕雄一, おもしろレオロジー, 技術評論社 (2010).
- [9] 専攻 web サイト <http://mp.pse.nagoya-u.ac.jp/>

著者紹介



増渕雄一 (博士 (工学)) : [経歴] 1996 年 名古屋大学工学研究科 博士課程修了, 山形大学, 名古屋大学, 東京農工大学, 京都大学を経て 2015 年から名大教授。[専門] レオロジー, 高分子物理 [趣味] 少し走って少し泳ぐこと。