

Title	界面活性剤水溶液中を自己駆動する液滴の分子種依存性
Sub Title	Molecular species-dependent motion modes of droplets in surfactant solution
Author	伴野, 太祐(Banno, Taisuke)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2024
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2023.)
JaLC DOI	
Abstract	運動は生命体を特徴づける重要な要素の一つである。生命体は、絶えず物質やエネルギーが流入・流出する非平衡系において、様々な化学反応が協奏的に進行する複雑な化学反応ネットワークを介して化学エネルギーが運動エネルギーに変換されることにより運動する。しかし、その機構は複雑なために全容は明らかにされていない。分子の特性から巨視的な物体の運動を誘導するための分子化学を確立できれば、生命体の運動機構を分子レベルから理解するための強力なツールとなる。本研究では、マランゴニ対流を駆動力として界面活性剤水溶液中を自発的に運動する油の粒（液滴）に着目し、実験・理論の両面から分子種の依存性を明らかにすることを目的とした。 。研究代表者である伴野は、水分子や極性基と強く相互作用することが知られているアミド結合を有する第四級アンモニウム塩型カチオン性界面活性剤（Am）を合成し、アミド結合の代わりにエステル結合を有する界面活性剤（Es）とそれら加水分解性の結合を有しない界面活性剤（N）水溶液中での液滴の運動性を比較した。その結果、Am水溶液中では液滴の駆動は認められず、Es水溶液中ではN水溶液中よりも液滴は速く駆動することを見出した。この違いを検証するべく、油水界面張力測定を詳細に行ったところ、三種の界面活性剤の臨界ミセル濃度に顕著な差異は認められなかったものの、界面張力が減少する速度および微小な界面活性剤濃度範囲における界面張力の低下度合いに違いが認められた。これらは、界面活性剤の界面への吸着速度と領域における界面張力差の双方がマランゴニ対流の強さ、つまり、液滴の駆動速度の違いに関連があることを示唆している。研究分担者である荒井は、界面活性剤の分子形状や液滴表面への界面活性剤の吸着様式に着目し、粗視化分子シミュレーションを駆使することで、界面活性剤の分子種により液滴の運動性に違いがあることを見出した。 Motion is one of unique dynamics observed in living system. Living organisms exhibit motion by transduction from chemical energy to mechanical energy in nonequilibrium conditions of which inflowed substances with high energy are convert to those with low energy through metabolism. However, the whole picture has not fully unraveled due to their complexity. A new molecular chemistry which can induce the targeted motion mode derived from molecular features could be a powerful tool for understanding the motion mechanism of living organisms at the molecular scale. Here, we have investigated the dependency of molecular species on the self-propelled droplets in surfactant solution due to the Marangoni convection from both experiments and simulation. According to the previous work that oil droplets composed of fatty nitriles frequently self-propelled in cationic surfactant solution, we synthesized the cationic surfactant containing amide linkages (Es) and ester linkages (Es). It is well known that amide linkages show a strong interaction with polar groups. The motion speed of the droplets in Es solution was faster than that in aqueous solution of the surfactant without hydrolyzable linkages (N). In the Am solution, no motion of droplets was observed. To investigate the difference in the motion mode, we carried out measurements of oil-water interfacial tension. As a result, there were differences in the rate at which the interfacial tension decreased and in the degree of interfacial tension lowering in a range of small surfactant concentration. Therefore, both dynamic and static differences in the interfacial tension probably led to the motion speed of droplets. In addition, we found that the necessary conditions for self-propelling droplets from the viewpoints of the molecular structure of surfactants and their adsorption behavior to the droplet surface by using dissipative particle dynamics simulation.
Notes	
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2023000013-20230038

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

2023年度 学事振興資金（共同研究）研究成果実績報告書

研究代表者	所属	理工学部	職名	准教授	補助額	2,000千円
	氏名	伴野 太祐	氏名（英語）	Taisuke Banno		
研究課題（日本語）						
界面活性剤水溶液中を自己駆動する液滴の分子種依存性						
研究課題（英訳）						
Molecular species-dependent motion modes of droplets in surfactant solution						
研究組織						
氏 名 Name		所属・学科・職名 Affiliation, department, and position				
伴野太祐（Taisuke Banno）		理工学部・応用化学科・准教授				
荒井規允（Noriyoshi Arai）		理工学部・機械工学科・准教授				
1. 研究成果実績の概要						
運動は生命体を特徴づける重要な要素の一つである。生命体は、絶えず物質やエネルギーが流入・流出する非平衡系において、様々な化学反応が協奏的に進行する複雑な化学反応ネットワークを介して化学エネルギーが運動エネルギーに変換されることにより運動する。しかし、その機構は複雑なために全容は明らかにされていない。分子の特性から巨視的な物体の運動を誘導するための分子化学を確立できれば、生命体の運動機構を分子レベルから理解するための強力なツールとなる。本研究では、マランゴニ対流を駆動力として界面活性剤水溶液中を自発的に運動する油の粒（液滴）に着目し、実験・理論の両面から分子種の依存性を明らかにすることを目的とした。 研究代表者である伴野は、水分子や極性基と強く相互作用することが知られているアミド結合を有する第四級アンモニウム塩型カチオン性界面活性剤（Am）を合成し、アミド結合の代わりにエステル結合を有する界面活性剤（Es）とそれら加水分解性の結合を有しない界面活性剤（N）水溶液中での液滴の運動性を比較した。その結果、Am水溶液中では液滴の駆動は認められず、Es水溶液中ではN水溶液中よりも液滴は速く駆動することを見出した。この違いを検証するべく、油水界面張力測定を詳細に行ったところ、三種の界面活性剤の臨界ミセル濃度に顕著な差異は認められなかったものの、界面張力が減少する速度および微小な界面活性剤濃度範囲における界面張力の低下度合いに違いが認められた。これらは、界面活性剤の界面への吸着速度と領域における界面張力差の双方がマランゴニ対流の強さ、つまり、液滴の駆動速度の違いに関連があることを示唆している。研究分担者である荒井は、界面活性剤の分子形状や液滴表面への界面活性剤の吸着様式に着目し、粗視化分子シミュレーションを駆使することで、界面活性剤の分子種により液滴の運動性に違いがあることを見出した。						
2. 研究成果実績の概要（英訳）						
Motion is one of unique dynamics observed in living system. Living organisms exhibit motion by transduction from chemical energy to mechanical energy in nonequilibrium conditions of which inflowed substances with high energy are convert to those with low energy through metabolism. However, the whole picture has not fully unraveled due to their complexity. A new molecular chemistry which can induce the targeted motion mode derived from molecular features could be a powerful tool for understanding the motion mechanism of living organisms at the molecular scale. Here, we have investigated the dependency of molecular species on the self-propelled droplets in surfactant solution due to the Marangoni convection from both experiments and simulation. According to the previous work that oil droplets composed of fatty nitriles frequently self-propelled in cationic surfactant solution, we synthesized the cationic surfactant containing amide linkages (Es) and ester linkages (Es). It is well known that amide linkages show a strong interaction with polar groups. The motion speed of the droplets in Es solution was faster than that in aqueous solution of the surfactant without hydrolyzable linkages (N). In the Am solution, no motion of droplets was observed. To investigate the difference in the motion mode, we carried out measurements of oil-water interfacial tension. As a result, there were differences in the rate at which the interfacial tension decreased and in the degree of interfacial tension lowering in a range of small surfactant concentration. Therefore, both dynamic and static differences in the interfacial tension probably led to the motion speed of droplets. In addition, we found that the necessary conditions for self-propelling droplets from the viewpoints of the molecular structure of surfactants and their adsorption behavior to the droplet surface by using dissipative particle dynamics simulation.						
3. 本研究課題に関する発表						

発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌 発行年 月 (著書 発行年 月・講演 年月)
上野和輝、小島知也、佐々木謙、荒井 規允、朝倉浩一、伴野太祐	界面活性剤水溶液中での油滴の自己駆動現象に対する分子論的考察	第61回日本油化学会 年会	2023 年9月
佐々木謙、上野和輝、小島知也、伴野太祐、荒井規允	界面活性剤を用いたアクティブエマルションの制御に関する粗視化分子シミュレーション	第60回日本伝熱シン ポジウム	2023 年5月
Y. Ishiwatari, T. Yokoyama, T. Kojima, T. Banno, N. Arai	Machine learning prediction of self-assembly and analysis of molecular structure dependence on critical packing parameter	Molecular Systems Design & Engineering	2024 年1月