

SMECS2024

第2回ソフトマテリアル工学 シミュレーション討論会

2024年3月1日(金)-2日(土)

慶應義塾大学 日吉キャンパス 来往舎



ソフトマテリアル工学
シミュレーション研究会

口頭発表

1 日目

IL1 古市 謙次 (東洋紡株式会社)

シミュレーションとキャリアに関する話題

講演者は、名古屋大学の大学院生であった 2000 年に土井正男先生の研究室で、高分子物理とソフトマテリアルに出会い、シミュレーションの研究を始めました。修士課程修了後は、東洋紡績株式会社(現東洋紡株式会社)に入社し、シミュレーションを業務とする部署に配属されました。以来、シミュレーションに関連する業務を生業としています。本講演では、管理職となった現在までのキャリアの流れを軸として、社会人ドクターなどの経験も踏まえて、これまでに感じたこと、得たことを話題として提供する予定です。

OR1 池田 高浩 (京都工芸繊維大学)

スリット内に閉じ込められた立方体パッチ粒子懸濁液の

自己集合構造とせん断挙動

近年の粗視化分子シミュレーションにより、立方体パッチ粒子はパッチの個数や配置、剪断の強さによって異なる自己集合構造をもたらすことが明らかになっている。しかし、壁面との相互作用下における自己集合構造の挙動については未知である。本研究は 2 枚の平行平板に閉じ込められた立方体パッチ粒子の分散系について、粗視化分子シミュレーションを用いてその集合挙動を明らかにする。

OR2 ○広井紀彦, 古市謙次 (東洋紡株式会社)

奥脇弘次, 小沢拓 (株式会社 JSOL)

望月祐志 (立教大学)

FCEWS を用いた MEL の構造形成シミュレーション

MEL はマンノースにエリスリトールと脂質がつながった糖脂質であり、親水部と疎水部を持つ両親媒性分子である。ラメラ構造を形成することから保湿剤として使用されており、肌荒れモデルでの回復効果が確認されている。本発表では立教大学にて開発された量子化学計算に基づく粒子間相互作用の自動計算システム「FCEWS」を用いて実施した、散逸粒子動力学法による MEL のラメラ構造形成について報告する。本研究は、HPCI システム利用研究課題(課題番号:hp210261, hp230016)を通じて、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施した。

OR3 山口 晃寛 (株式会社日立製作所)

分子シミュレーションを活用した 生分解性ポリマーブレンド材料の設計

プラスチック廃棄物による環境汚染問題が深刻化し、生分解性プラスチックなどの環境に配慮した材料への期待が高まっている。生分解性プラスチックを適用する際の課題は、実用に耐えうる性能と低コストの両立であり、そのためには材料特性を最大限に引き出す配合設計やプロセス条件を追求する必要がある。本発表では、安価な天然高分子であるデンプンと生分解性ポリエステルブレンド材料設計に対して、分子シミュレーションを活用した事例を紹介する。

OR4 鷲津 仁志 (兵庫県立大学)

マルチスケール流体シミュレータの開発

低分子の溶媒に対して高分子やミセル等の超分子が高次構造を形成する系は、自然界および産業界に多く存在し、その複雑な流動特性により高機能を発現する。我々はこれらの系をマルチスケール流体と呼称し、解析ツールを長年にわたり構築してきた。ブラウン運動を行う溶質を Langevin 動力学で、溶媒の流動を格子 Boltzmann 法により Navier-Stokes 方程式で扱い、両者を流動場の応力により連成する。これまで、バネビーズ模型、極性分子、タンパク質、United Atom モデルなどを実装し、潤滑油や血液のシミュレーションなどに適用した。本報告では、粘度調整剤高分子が粘度の温度依存性を平滑にする機構や、血栓形成の初期過程において VWF タンパク質の形態変化について説明する。後者は「流動場におけるタンパク質のフォールディング」という新しいテーマを提案している。

2 日目

IL2 山口 哲生 (東京大学大学院)

脱サラ研究者のすゝめ

本講演では、エンジニア経験を生かして大学で基礎研究を行っている一研究者の事例を紹介する。学生さんの今後のキャリア形成の参考になれば幸いです。

OR5 ○石渡悠幹, 横山貴洸, 小島知也, 伴野太祐, 荒井規允 (慶應義塾大学)

機械学習による両親媒性分子の自己集合構造予測および化学構造依存性解析

両親媒性分子は水中で自発的に分子集合体を形成し, その形態ごとに多様な機能を発現する. 両親媒性分子は身の回りの製品に広く用いられているが, 製品開発においては試行錯誤的な実験が主流であり, 莫大なコストが問題視されている. そこで本研究では, 機械学習を用いて分子構造から直接分子集合体の形状を予測すると共に, 化学構造のどのような因子が分子集合体の形状を決定するのに影響しているのかを明らかにした.

OR6 佐々木謙 (慶應義塾大学)

散逸粒子動力学法を用いた水/油/界面活性剤系における油滴の駆動制御

界面活性剤水溶液中において, 界面張力差を要因とした油滴の自己駆動現象が観測されている. 本現象における油滴の挙動を分子レベルで解明するべく, 分子シミュレーションを用いて油滴の自己駆動現象を再現し, 駆動に影響を与える種々のパラメータを検討する. 結果として, 散逸粒子動力学法(DPD法)を用いて油滴の自己駆動現象, 並びにその駆動メカニズムである内部流れを再現することに成功した.

OR7 ○大石達真, 石田崇人, 土肥侑也, 畝山多加志, 増淵雄一 (名古屋大学)

Florian Müller-Plathe (Technische Universität Darmstadt)

RNEMD を用いた絡み合いのない Kremer-Grest メルトの定常剪断粘度

本研究では Reverse nonequilibrium molecular dynamics (RNEMD)の手法を用いて絡み合いのない Kremer-Grest メルトの定常剪断粘度を議論する. RNEMD は系内部の運動量を交換することで応力を印加し, その結果として現れる剪断場を解析することで定常剪断粘度を取得する. この手法は, 低分子系に対してはよく調べられているものの, 高分子系に対する応用は限定的で, 詳細な議論は未だ不十分である. そこで本研究では, 高分子の代表的なモデルである Kremer-Grest モデルを使用し, RNEMD の高分子系への適用性について議論する.

OR8 荒井 規允 (慶應義塾大学)

散逸粒子動力学 (DPD) 法の基礎から応用まで

散逸粒子動力学(DPD)法は原子や分子をある程度一纏めとして扱った粗視化分子シミュレーション手法の一種で, 従来の分子シミュレーション手法に比べ大きな時空間スケールの現象を再現できる. 本発表では, DPD 法の歴史, アルゴリズムを簡単に説明したあと, DPD 法の弱点を踏まえた発展的な DPD 法について紹介する.

ポスター発表

1. 全原子 MD によるリチウム石けんの初期凝集ダイナミクスの解析
西村泰風（兵庫県立大学大学院 情報科学研究科）
2. SPH 法による金属固体モデルの摺動部における
焼き付きシミュレーション
藤田晃徳（兵庫県立大学大学院 情報科学研究科）
3. 分子動力学法による層状酸化グラフェンの摩擦挙動シミュレーション
友清貴之（兵庫県立大学大学院 情報科学研究科）
4. 散逸粒子動力学法を用いた
高内相 O/W 型エマルションの乳化安定性に関する研究
鈴木虎次郎（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）
5. The Relationship between Nanostructured Bio-Inspired Material
Surfaces and the Free Energy Barrier Using Coarse-Grained
Molecular Dynamics
Meng Fan（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）
6. 機械学習を活用した高洗浄性能を有する洗顔料処方の予測
濱口直（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）
7. ABC スターポリマー薄膜のタイリング形状と機械的性質に関する
DPD シミュレーション
大里直也（慶應義塾大学 理工学部）

8. 機械学習と分子シミュレーションを組み合わせた両親媒性分子が作る自己
集合構造の定量的分類

須藤健生（慶應義塾大学 理工学部）

9. 木材ーゴム柔軟複合材料におけるフィラー構造の影響

下形晃平（東京大学大学院 農学生命科学研究科）

10. 枝葉の生え方により異なる樹木の振動特性

藤原英明（東京大学大学院 農学生命科学研究科）

11. ナノチューブ閉じ込め系におけるコレステリック液晶の相変化の

DPD シミュレーション ~ねじれ半径とピッチの影響~

山田一威（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）