

SMECS2025

**第3回ソフトマテリアル工学
シミュレーション討論会**

2025年3月14日(金)-15日(土)

東京大学 弥生講堂 セイホクギャラリー

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

OR1 ○佐藤碧海, 安田一希, 荒井規允, 泰岡顕治 (慶應義塾大学)

全原子分子動力学法を用いた氷-ポリマー界面における氷融解挙動の変化

氷表面において、融点以下の温度においても氷が融解しプレメルト層と呼ばれる疑似液体層を形成することが明らかになっている。このプレメルト層は摩擦などの氷表面における物性に大きな影響を与えるが、その挙動については未だ明らかにされていない箇所が多い。本研究では、全原子分子シミュレーションを用いて氷-ポリマー界面における摩擦の影響について明らかにすることを目的とする。

OR2 ○西村泰風, 岡本隆一, 鷲津仁志 (兵庫県立大学)

リチウム石けん系増ちょう剤の自己組織化に関する分子動力学シミュレーション

リチウム石けんは潤滑剤であるグリースの増ちょう剤(ゲル化剤)として用いられており、世界で 7 割近いシェアを持つ。グリースの潤滑性能は増ちょう剤の種類によって大きく変化し、その要因の 1 つとして油中で形成される増ちょう剤繊維の形態が影響すると考えられている。増ちょう剤の化学構造の違いが繊維構造に与える影響をミクロな視点から調べるために、分子動力学法を用いて増ちょう剤の初期凝集過程を解析した。

IL1 白鳥和矢 (三菱ケミカル株式会社)

【招待講演】機械学習・シミュレーションと企業研究

ポスター発表

1. O牧野真人 (RIST), 柳澤隆 (GSI クレオス), 城野亮太 (RIST)

2 成分からなる表面の摩擦係数評価のシミュレーション

2 成分からなる複合材料の摩擦係数を理論、シミュレーションで見積もることを検討した。シミュレーションは、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)を用いた。本研究の結果から、硬くて滑りやすい材料を添加すると摩擦係数を低減できることを予測した。

2. O山口哲生 (東京大学), 上信陽太郎 (東京大学)

樹皮パターン形成に関するシミュレーション

樹木の幹の表面にみられる樹皮は、種類ごとに異なる模様(パターン)を示す。本研究では、さまざまな樹皮パターンを統一的に説明する物理モデルを提案し、シミュレーションを行ったところ、パラメータの違いで異なるパターンを再現することに成功した。

3. 山口晃寛(日立製作所), O荒井規允 (慶應義塾大学)

熱可塑性デンプン/生分解性ポリエステル複合材料における相分離界面の密着性向上に関する研究

石油由来プラスチックによる環境汚染が問題視される中、澱粉と樹脂をブレンドしたバイオマス複合材料が注目されている。しかし、澱粉/樹脂間の界面密着性が低いため、衝撃強度の低下が課題となる。本研究では、澱粉と各種樹脂間の界面密着性を MD シミュレーションにより評価する手法を考案した。さらに、密着性の高い樹脂の選定と、澱粉のエステル変性による界面強化の効果を解析し、バイオマス複合材料の設計指針を示した。

4. 松尾美香 (九州大学)

積分方程式理論を用いた溶媒の多成分化による分子認識制御の理論解析

本研究では、分子認識における溶媒分子の並進運動の影響を解明するため、環状ホスト分子と球状ゲスト分子の相互作用を解析した。特に、溶媒の多成分化が認識プロセスに与える影響に着目し、積分方程式理論を用いて平均力ポテンシャル(PMF)を計算した。結果として、異なるサイズの溶媒分子を混合すると、自由エネルギー障壁が大幅に低減される一方で、認識の安定性は単成分溶媒とほ

ば変わらないことが判明した。これにより、適切な溶媒環境を選択することで、分子認識の制御が可能であることが示唆された。

5. ○久本健太, 小林祐生, 池田高浩, 山川勝史 (京都工芸繊維大学)

粗視化分子シミュレーションによる準一次元液体の異常熱輸送解析

ナノ流体工学の発展により、ナノスケール流体系での熱輸送制御が注目されている。近年、準一次元の固体ナノチューブ系で異常熱輸送が発生することが報告されている。本研究では、分子動力学法と多粒子衝突動力学法を用い、準一次元液体における異常熱輸送の発生条件と高分子添加の影響を解析した。その結果、系に十分な異方性を与えることで液体でも異常熱輸送が生じ、高分子濃度によって熱輸送特性が変化することを明らかにした。

6. ○山田一威 (慶應義塾大学), 荒井規允 (慶應義塾大学)

DPD シミュレーションを用いた三次元クエット流れの液滴マージネーション

本研究では液滴マージネーションに注目した。DPD 法を用いることで、自己集合とマージネーションの両方の現象を分子レベルで直接可視化することが可能であり、実験や理論ではアプローチの難しい非平衡な現象を DPD 法で再現し、マージネーションの基礎的な物理を分子論の観点から考察できるようになる。DDS などのより応用的な、マイクロな分子の情報を反映させた血管内シミュレーションに向け、三次元クエット流れでの DPD 法による多数の液滴が流れる系を計算し、液滴の半径比や摩擦パラメータを変化させることでマージネーションの発生を調べた。

7. ○佐藤遼一 (慶應義塾大学), 塚越詩織, 田中礼央 (雪印メグミルク(株)), 荒井規允 (慶應義塾大学)

分子動力学シミュレーションによる界面活性剤の不飽和度が油水界面挙動に及ぼす影響の研究

本研究では、飽和脂肪酸モノグリセリド(モノパルミチン)と不飽和脂肪酸モノグリセリド(モノオレイン)の界面挙動を分子シミュレーションで解析した。結果、密度分布ではモノオレインが均一に広がるのに対し、モノパルミチンは局在化して分布することが確認できた。また、オーダーパラメーターではモノパルミチンが高い値を示し、結晶性の高い構造をとった。そして、モノオレインは界面を効率的に埋めることが確認された。

8. ○上田大晟, 小林祐生, 池田高浩, 山川勝史 (京都工芸繊維大学)

表面修飾ナノ粒子を用いた高分子ナノコンポジットに関する分子動力学計算

本研究では、Janus ナノ粒子の表面相互作用の異方性がポリマーナノコンポジットのガラス転移温度 (T_g) に与える影響を調査した。その結果、T_g はナノ粒子間の凝集によって上昇することが分かった。また凝集構造は表面の数や位置で変化することも分かった。さらに、ポリマーグラフトナノ粒子を用いたアルキメデスタイリング構造を持つ薄膜の形成条件についても検討を行った。

9. ○孟凡 (慶應義塾大学), Jialong Liu (北京化工大学), 荒井規允 (慶應義塾大学)

Solid surface adsorption behavior in FePt chemical cells by MD Simulation

FePt 化学セルにおいて CH₃OH が CO₂ に変換される過程を分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて研究します。反応メカニズムの中で、水は OH を供給し、CO が中間生成物として生成されます。FePt 表面に吸着する水、硫酸、メタンの割合を調べ、反応過程における支配的な要因を明らかにします。また、FePt 合金のミラー係数を変更し、吸着物質の比率への影響を評価します。将来的には電場・磁場の影響も追加し、反応メカニズムをより深く理解することを目指します。

10. ○叶明碩, 佐藤碧海, 荒井規允 (慶應義塾大学)

プレメルティング層におけるハイドレート生成の分子動力学シミュレーション

この研究では、プレメルティング現象に注目しています。分子レベルのシミュレーションを行い、メタンと水がどのように相互作用するかを調べています。また、温度や圧力といった条件が水合物の生成を助ける仕組みや、固体表面の性質が与える影響も分析しています。最終的には、これらの知見をもとに、天然ガスハイドレートの効率的な生成と保存方法の開発につなげたいと考えています。

11. ○森岡大凱, 小林祐生, 山川勝史 (京都工芸繊維大学)

散逸粒子動力学法を用いた高分子ブラシ壁内における高分子グラフトナノ粒子の自己集合と流動特性

ポリマーブラシ壁は優れた潤滑性能を持ち、ポリマーグラフトナノ粒子(PGNP)の添加により機械的安定性が向上する。本研究では、散逸粒子動力学シミュレーションを用いて、PGNPs の自己集合構造が摩擦係数とせん断粘度に及ぼす影響を調べた。良溶媒中では PGNP は分散し、グラフト密度別では顕著な差は現れなかった。貧溶媒中では PGNP 同士がクラスターを形成し、せん断速度に応じて変形・崩壊した。また、構造変化に伴い、摩擦係数も変化した。

2 日目

IL1 須藤海 (Nature Architects 株式会社)

【招待講演】折紙工学・メタマテリアルを活用した製品設計

OR3 垂水竜一 (大阪大学)

ソフトロボットシミュレーションの計算力学

ソフトロボットは柔らかいロボットの総称で、柔軟な運動特性により日常生活や医療・災害現場など多方面への応用が期待されているが、運動時には多様な非線形力学特性(座屈不安定、接触、摩擦など)が現れることから、その設計・制御は容易でない。講演では、我々のグループで進めている汎用的なソフトロボットシミュレータの研究開発へ向けた取り組みについて紹介したい。

OR4 板倉大輔, 坂口圭祐, O古市謙次 (東洋紡 (株)), 百濟彰, 岡田有司, 新田浩之 (東レエンジニアリング D ソリューションズ (株)), 松尾剛 (海上・港湾・航空技術研究所)

炭素繊維強化樹脂 成形加工とシミュレーション

CTT (Chopped fiber Tape layered Thermoplastic CFRP) は、ポリプロピレンと不連続炭素繊維の積層体で、異方的なレオロジー挙動を示す。本研究では、CTT の異方性を考慮した粘度モデルを構築し、特異的な流動挙動と圧縮成形時における荷重を再現することに成功した。その概要を報告する。

OR5 O池田高浩, 小林祐生, Azmil Haris, 山川勝史 (京都工芸繊維大学)

分子動力学を用いた Janus ナノ流体の熱伝導率の計算

ナノ粒子懸濁液(ナノ流体)の熱伝導率は、ナノ粒子の表面特性や凝集構造に依存する。Janus 粒子は表面異方性に加えて等方性粒子には無い凝集構造を有するため、ナノ流体の熱輸送特性を制御する方法として期待できる。しかし、これまでに Janus 粒子がナノ流体の熱輸送特性に及ぼす影響を考察した研究は多くない。本研究では分子動力学を用いて、Janus 粒子の表面異方性と集合構造が熱伝導特性に及ぼす影響を明らかにする。

OR6 ○大里直也(慶應義塾大学), 山口晃寛(日立製作所), ○荒井規允(慶應義塾大学)

バイオ複合材料のコアシェル構造を再現する DPD から MD へのリバースマッピング手法の開発

環境問題の深刻化から再生可能資源を原料とした材料、特にプラスチックをデンプンや多糖類と複合させたバイオ複合材料が注目されている。バイオ複合材料は内部で相分離構造を形成することが知られており、材料特性に与える影響を調べるシミュレーション手法が求められる。そこで本研究では、粗視化モデルを用いて大規模な相分離挙動を再現し、その後全原子モデルによる詳細解析を実現するリバースマッピング手法を開発した。