

SMECS2026

第4回ソフトマテリアル工学 シミュレーション討論会

2026年3月12日(木)-13日(金)

三菱ケミカル Science & Innovation Center

主催：ソフトマテリアル工学シミュレーション研究会

共催：慶應義塾大学大学院 理工学研究科 SMECS 研究ユニット



口頭発表

1 日目

IL1 金城友之（株式会社豊田中央研究所）

”使える” DPD のための几帳面な粗視化モデル作り - 全原子モデルに基づいた定量化の試み -

散逸粒子動力学法 (DPD) は分子を粗視化して表現する粗視化シミュレーションの一種である。ソフトウェア系のシミュレーション手法として広く使われているが、多くの場合その粗視化モデルは定性的なものにとどまっている。本研究では全原子モデルに基づいて DPD の粗視化モデルを構築し、高分子電解質溶液の乾燥過程のシミュレーションを行った。シミュレーションから得られた構造は小角 X 線散乱の結果とよく一致することが示された。本講演では粗視化モデルの構築方法とシミュレーション結果について報告する。

OR1 濱口直（慶應義塾大学）

フリーランスのすゝめ

フリーランスとして働くことの紹介 (荒井先生からの発表依頼)

OR2 臼井宏太（三菱ケミカル）

JACI 高分子 WG の紹介

JACI 高分子 WG では、ソフトマテリアルのための統合シミュレータ「OCTA」を使って、高分子シミュレーションの理論背景の学習や解析結果の議論をおこなっている。本発表では、「OCTA」の簡単な紹介をしたあとで、JACI 高分子 WG で取り組んでいる基礎講座、講演会、全体討論、OCTA 演習の内容を紹介する。

OR3 城野亮太（RIST）

粗視化による空間スケール縦断の試み ナノ炭素材料の物性研究

我々はナノ炭素材料を微量添加することによって発現した低摩擦材料の作用機序を解明することを目的に、nm スケールから μm を経て mm スケールまでを縦断するマルチスケール研究を行っている。SEM 内蔵ナノインデンテーションと万能試験機による μm と mm スケールの弾性率・摩擦特性を分子動力学計算によって接続することで現象の理解を目指している。本発表ではその試みと現在までの結果について紹介する。

OR4 山口哲生（東京大学）

粘着・剥離の多階層動力学シミュレーション

粘着・剥離現象は、やわらかい高分子が被着体から剥がれる際に、複雑な変形を伴う、多階層的な動力学現象である。本研究では、メソとマクロとの階層間接続をするためのアプローチについて検討を行った。

ポスター発表

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

TLSPH による粘弾性固体の外部応答とエネルギー収支の検証

Total Lagrangian SPH (TLSPH) を用いて、大変形を伴う粘弾性固体の外部応答を解析した。Kelvin-Voigt および Zener モデルを対象とし、定常外力下での変形挙動とエネルギー収支を粒子レベルで評価した。自由エネルギーと散逸エネルギーを明示的に定義し、数値計算においてエネルギー整合性が満たされることを示す。

2. 堂庭颯汰(京都工芸繊維大学)、小林祐生(京都工芸繊維大学)、山川勝史(京都工芸繊維大学)

ピッカリングエマルションの機械特性に関する分子動力学シミュレーション

本研究では、ヤヌスナノ粒子および高分子グラフトナノ粒子で安定化されたエマルション液滴の圧縮応答について、分子動力学法を用いて解析を行った。高分子グラフトナノ粒子を用いた系では、特定のグラフト密度において、ナノ粒子の圧縮による界面再配置が生じ、その結果として高い機械安定性を示すことがわかった。

3. 大重翔, 樋口光, 深澤倫子 (明治大学理工学部)

coil-globule 転移における高分子側鎖の構造の効果

温度変化に応じて高分子が coil 状態から globule 状態に構造変化する現象を、coil-globule (CG) 転移とよぶ。CG 転移には高分子-水間の親水性相互作用と疎水性作用が関わっていることが示唆されているが、官能基の種類に応じた効果については十分に体系化されていない。本研究では、様々な官能基を持つ両親媒性高分子を対象として分子動力学計算を実施し、CG 転移と高分子側鎖の構造の関係を解析した。

4. 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)

Adsorption kinetics of small molecules on FePt metallic electrode by molecular dynamics simulation

触媒表面での反応物の滞在時間(吸着時間)を理解することは、界面ダイナミクスと反応効率を結び付ける上で重要である。多段階系のメタノール酸化反応(MOR)では、反応経路や被毒が吸着時間と分子配向に強く依存する。MD法により、(001)/(100)/(111)面を露出した FePt 合金上のメタノール・硫酸・水を解析し、吸着時間を定量化した。吸着時間はメタノール>硫酸>水。界面には、C-downで接近する約 5 Å の誘導層と、C-O 結合が表面に平行へ再配向する約 3 Å の反応層が存在する。(111)面は Pt/Fe 交互配列により最も強く吸着し、メタノールの吸着時間は(001)より約 18 ps 長い。これらは原子構造・吸着時間・配向を結ぶ統一的枠組みを示し、FePt 系電極触媒設計に時間分解の指針を与える。

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

低油分濃度条件下における界面活性剤の不飽和度がエマルジョン安定性に与える影響の解明

本研究では、エマルジョン安定性に対する界面活性剤飽和度の影響を、モノパルミチン(PAL)およびモノオレイン(OLE)の2種類を用いて比較検討した。実験およびMD解析の結果、OLEは屈曲した不飽和鎖に由来する柔軟性と分子運動性により、低被覆条件でも界面を効率的に安定化すること確認された。一方、PALは秩序的なドメインを形成しやすく、混合系ではPALとOLEが部分的に分離する傾向が明らかとなった。

6. 叶明碩(慶應義塾大学)、佐藤碧海(慶應義塾大学)、孟凡(慶應義塾大学)、荒井規允(慶應義塾大学)

プレメルト層におけるメタンハイドレートの核生成に関する分子動力学シミュレーション

天然ガスハイドレートは高圧低温で水ケージにガスが包接された結晶である。融点近傍の氷表面に生じるプレメルト層は高い分子運動性と低界面張力により核生成を強く促進する。本研究ではGROMACSによるMD(TIP4P/Ice水+メタン)で同層内の生成機構と圧力依存性を解析した。圧力上昇で生成速度が増し、5²小ケージ形成後に5²6²大ケージが安定化してsI成長が促進。配位数とケージ占有率で定量化した。

7. 上田大晟(京都工芸繊維大学大学院)、小林祐生(京都工芸繊維大学)、池田高浩(京都工芸繊維大学)、山川勝史(京都工芸繊維大学)

粗視化分子動力学法によるポリマーグラフトナノ粒子を有するポリマーナノ薄膜の秩序構造の形成条件及び力学特性の解明

粗視化分子動力学法を用いてポリマーナノ薄膜の秩序構造の形成条件とその力学特性を調べた。ポリマーグラフトナノ粒子を添加した系の平衡シミュレーションを行い、秩序構造の形成に適したグラフト密度、剛性の条件を明らかにした。さらに、一軸引張シミュレーションにより、自己集合構造が力学特性に及ぼす影響を明らかにした。

8. 董俛(慶應義塾大学)、鈴木虎次郎(慶應義塾大学)、小林祐生(京都工芸繊維大学)、荒井規允(慶應義塾大学)

散逸粒子動力学法による o/w 型エマルション液滴の安定性に関する研究

エマルションの乳化安定性に及ぼす界面活性剤分子構造の影響を、散逸粒子動力学法と操舵分子動力学法による分子シミュレーションで解析した。ポリオキシエチレン系界面活性剤およびポリグリセリン脂肪酸エステルを対象に界面張力と液滴衝突挙動を評価した結果、親水基数の増加により界面張力低下は抑制される一方、衝突時の抵抗力は増大した。密度分布解析から、乳化安定性に与える影響を調査した。

9. 大里直也(慶應大理工)、山口晃寛(慶應大理工)、荒井規允(慶應大理工)

スターポリマー薄膜構造におけるリバースマッピングを活用した自己組織化パターンと力学特性応答に関する研究

本研究では、全原子シミュレーションと粗視化シミュレーションを橋渡しするリバースマッピング技術を用い、スターポリマーの自己集合構造と力学特性との関係を検討した。スターポリマーのアーム長の比率を変化させることで形成されるタイリングパターンが変わり、それに伴って一軸引張変形における応力応答や空孔生成挙動が変化することを確認した。さらに、自己集合構造の違いに起因して力学応答に異方性が生じることを明らかにした。

10. 井上翔太(北里大学)、關拓和(北里大学)、篠崎雄大(北里大学)、竹谷純一(東京大学・NIMS)、岡本敏宏(東京科学大学)、渡辺豪(北里大学)

スパースモデリングを用いた有機半導体結晶の隣接分子間角度の予測

有機半導体は柔軟な電子デバイスへの応用が期待される。高移動度化において、結晶中での分子間の電荷伝導に2次元性が生まれる特徴的な分子配列が重要である。本研究では分子設計指針の獲得を志向して、高解釈性の物理化学記述子とスパースモデリングを用いた多重線形

回帰による有機半導体結晶の隣接分子間角度の予測に取り組み、分子間角度の制御において重要な幾つかの物理化学的特徴を見出した。

11. 關拓和(北里大学)、篠崎雄大(北里大学)、佐藤俊輔(北里大学)、伊藤良将(北里大学)、竹谷純一(東京大学・NIMS)、岡本敏宏(東京科学大学)、渡辺豪(北里大学)

機械学習と分子シミュレーションによる p 型有機半導体の結晶構造予測

有機半導体の実用化に資する高い電荷移動度の達成には、取りうる結晶構造を考慮した分子設計が重要である。現状の分子設計は、実験研究者の知識や経験則に依存しており、効果的な計算科学的手法の活用が課題となっている。そこで、本研究では有機半導体の π 共役骨格の 2 次元のパッキング構造を予測可能な機械学習モデルを構築し、分子シミュレーション手法と組み合わせることで p 型有機半導体の結晶構造予測を目指した。

2 日目

IL2 菊池伯夫(株式会社クオンタムフラワーズ&フーズ)

「量子バイオテクノロジーが未来を拓く」

量子バイオテクノロジーは、物理学と生命科学を融合させ、地球規模の課題解決を可能にする新しい科学領域です。本発表では「量子バイオテクノロジーが未来を拓く」をテーマに、中性子線育種を核とし、加速器技術、AI、量子コンピューティングを組み合わせた最先端の取り組みをご紹介します。これらの技術を活用して植物や微生物の潜在能力を引き出し、食品、医薬、エネルギー、脱炭素など多様な産業分野への応用を通じて、持続可能な社会の実現を目指しています。

OR5 西村泰風, 高橋尚毅, 岡本隆一, 鷺津仁志(兵庫県立大学)

無極性溶媒の分子構造が増ちょう剤凝集ダイナミクスに与える影響

グリースのゲル化剤として用いられる増ちょう剤は、油中で凝集する自己組織化分子である。この増ちょう剤が形成するネットワーク構造は油の種類によって変化することが分かっており、無極性溶媒も例外ではない。そこで、本研究では無極性溶媒の分子構造が増ちょう剤の初期凝集過程に及ぼす影響を、分子動力学シミュレーションにより解析した。

OR6 佐藤碧海(慶応義塾大学)

氷-ポリマー界面における水分子界面挙動の分子シミュレーション

氷-ポリマー界面における水分子挙動は、着氷・防氷や摩擦制御において重要であり、特に融点近傍で形成される準液体層が界面特性を支配する。しかし、その分子論的理解は未だ不十分である。

本研究では、全原子分子動力学シミュレーションを用いて、異なる表面特性を有するポリマー界面における水分子の構造および動力学を解析した。その結果、ポリマー表面特性に応じて界面水の挙動が変化することを明らかにした。

OR7 池田高浩(京都工芸繊維大学)、小林祐生(京都工芸繊維大学)

ナノ流体の熱伝導率に関する分子動力学計算

高い熱伝導率を有するナノ流体では、粒子の分散・凝集状態が熱輸送特性を大きく左右する。本講演では、前回一部報告した Janus 粒子の凝集構造と熱伝導率の熱輸送メカニズムについて、最終的な結果を報告する。さらに、近年優れた分散性と熱伝導率向上の観点で注目されているポリマーグラ

フトナノ粒子ナノ流体について, ポリマー・溶媒の界面構造が熱輸送機構に及ぼす影響を, 分子動力学を用いて明らかにした結果を報告する.