

2025年6月6日

1/18

理工学部 教授@・准教授就任講演@マルチメディアルーム

ソフトマターの分子シミュレーション

理工学部 機械械工学科

荒井 規允(Noriyoshi ARAI)

arai@mech.keio.ac.jp



略歴

● 1981.5

千葉県南房総市 (千倉町) 生まれ

● 2004.3

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 卒業

● 2006.3

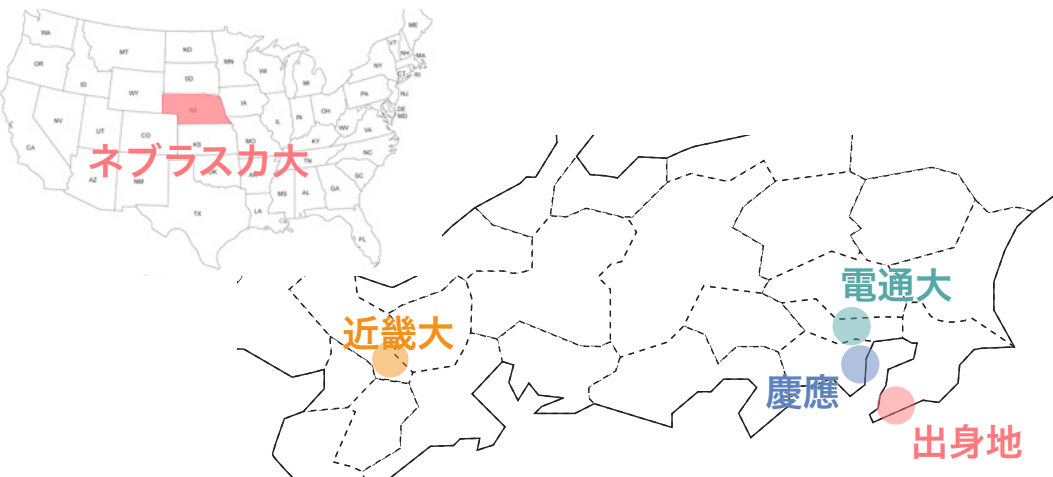
慶應義塾大学大学院 理工学研究科 修士課程 修了

● 2009.3

慶應義塾大学大学院 理工学研究科 博士課程 修了
博士(工学) 取得



5年



● 2009.4 - 2014.3

電気通信大学大学院 知能機械工学専攻 助教



5年

● 2012.4 - 2013.2

University of Nebraska-Lincoln,
Visiting Assistant Professor



UNIVERSITY of NEBRASKA
LINCOLN

5年

● 2014.4 - 2018.3

近畿大学 理工学部 機械工学科 講師

● 2018.4 - 2019.3

近畿大学 理工学部 機械工学科 准教授
近畿大学 理工学総合研究所 (兼任) 准教授



5年+

● 2019.4 - 2025.3

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 准教授

5年?

● 2025.4 ~

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 教授

次なるターニングポイントに備え
誠心誠意努力してまいります

Keio University





ソフトマターの分子シミュレーション (キーワード)

■ 材料や生体機能の分子論的な起源を解明 → 未踏の物性・機能性の実現

ソフトマター

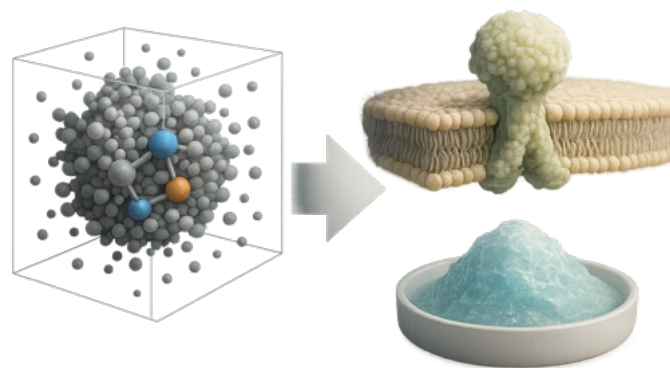
分子シミュレーション

AI活用
機械学習

1. ソフトマターとは？

2. 分子シミュレーション@慶應理工

3. AI活用で何ができるようになる？





1. ソフトマターとは？

■ 定義

高分子や液晶分子，コロイド微粒子などで構成される**外力に対して複雑な応答**を示す柔らかい物質



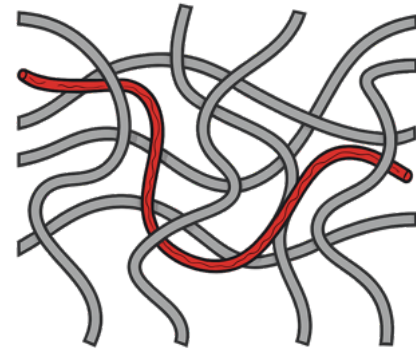
<https://royalsocietypublishing.org>

P. de Gennes

Prof. Pierre-Gilles de Gennes (1932-2007)

- ✗ 構成要素が大きく，原子の姿が見えない
- ✗ 熱平衡が実現しにくく，実験で再現性がとれない
- ✗ やわらかいため壊れやすく物性測定が難しい

- 複雑な物質の現象をスケーリング理論で一般化できる
- ノーベル物理学賞 (1991)
- 講演題目: “**Soft Matter**”
← Complex fluid (複雑流体)



機能性材料の宝庫



ゴム



化粧品



洗剤



衣類



アイス

我々の肉体そのものはソフトマターであり，ソフトマターを食べ，ソフトマターで化粧をしソフトマターをまとして生きている。

未踏の物性・機能性の実現: 適した題材



1. ソフトマターとの出会い: 大学院時代 (~2004)

出典

<https://royalsocietypublishing.org>
<https://www.linkedin.com>
<https://profs.provost.nagoya-u.ac.jp>
<https://www.st.keio.ac.jp/>

5/18

研究テーマ選び



泰岡教授

これまで研究室でやっていたテーマと
新しいテーマどちらが良い？

『ベシクル』

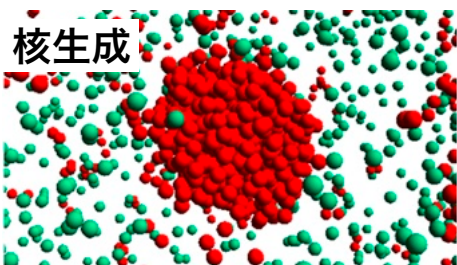
ベシクル？

もちろん「新しいテーマ」で！

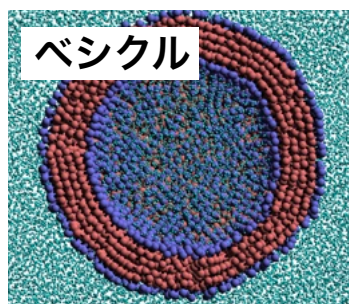


荒井

● スケールの違い



Å ~ 数 nm



数10 nm ~ 100 μm

- 全原子MD法だと取り扱い困難・・・
- 学部時代の杵柄, 他の計算手法があるかも！

2004年7月16日(金)@東工大百年記念館

高分子計算機科学研究会「粗視化シミュレーションの新しい方法論」

ソフトマターの分子シミュレーションは
新しい分野. **今からやれば天下が取れる！**

ソフトマターのスーパースターに囲まれて
研究生活のスタートを切ることができた



Prof. de Gennes

友人

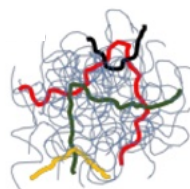


土井教授

師弟



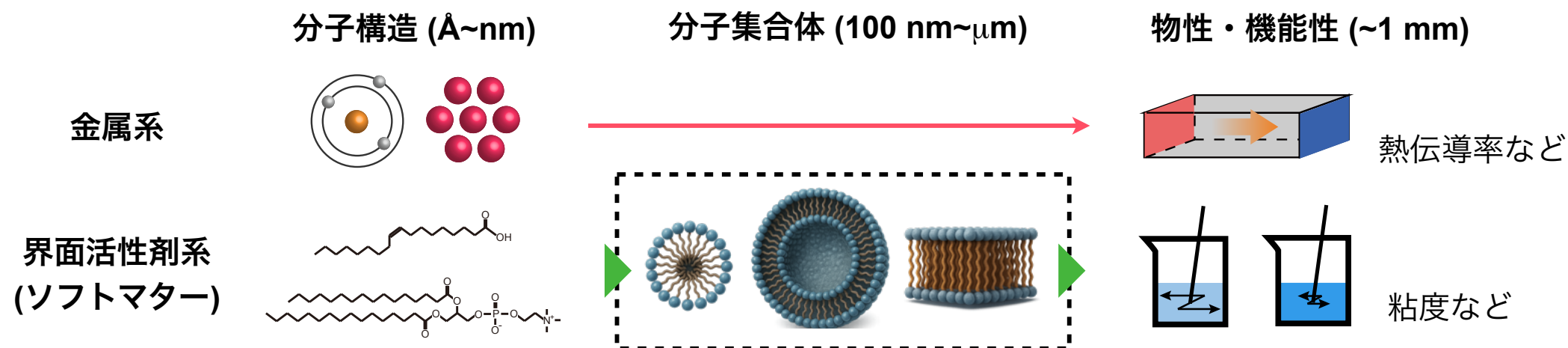
増淵教授



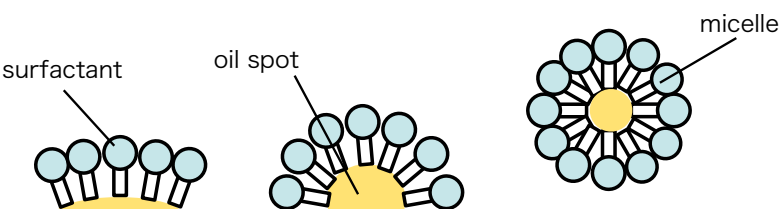


1. ソフトマター材料設計の困難さ

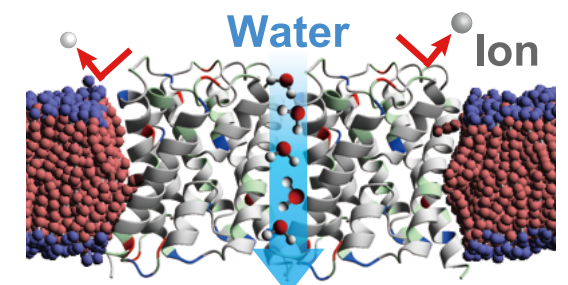
■ 材料内部の多階層性



■ 分子が集まって機能性発現



界面活性剤の洗剤効果(ミセル構造)



アควアポリンチャネル
(水を選択的に透過する分子膜)

物性・機能性を知るには
幅広いスケールの現象を
考慮しなければならない



1. 実際の製品開発では？ 分子シミュレーションの登場

■ 分子集合体は分子の持つ性質 → 分子レベルのデザインが必要！ だが・・・

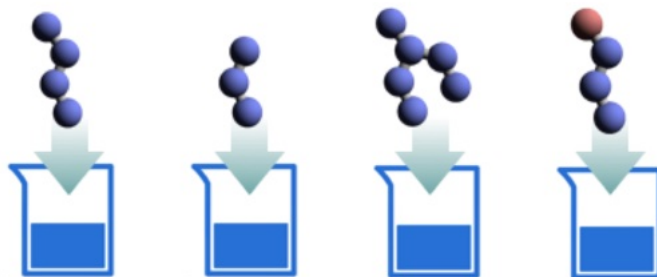
実際の製品開発

- ✗ 分子・集合体は見えない
- ✗ 理論の確立が不十分

製品は必要

試行錯誤的な
設計・開発

形状を少し変えた分子で数100パターン以上・・・



それぞれの試作品で実験・・・



結局一番優れていたのは・・・



✗ 開発コストが莫大

- 分子を用意
- 再現性

✗ 次回の開発への知見

- なぜ良い結果が得られたのか不明

分子シミュレーション

分子自体が持つ特徴・集合構造や過程を
ダイレクトに観察可能

現在のわからないこと
(なぜその分子が一番良いか)だけでなく
まだ起こっていない未来のことを提案可能



2. 分子シミュレーションとは？

■ **定義** 計算機を用いて物質の**分子の運動**を再現し，構造や動的性質を数値的に解析する手法

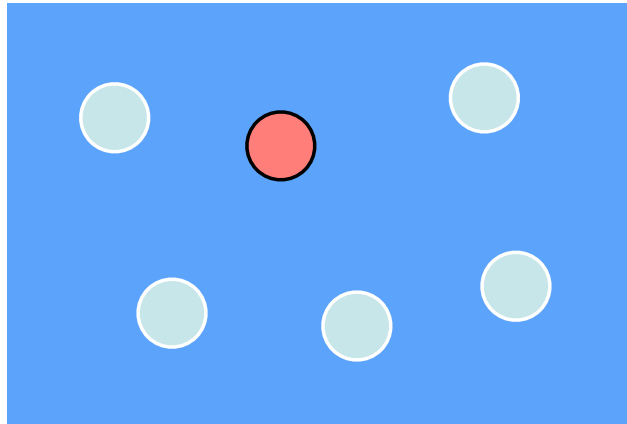
Newtonの運動方程式

$$\mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$$

位置 $r(t)$ ，速度 $v(t)$

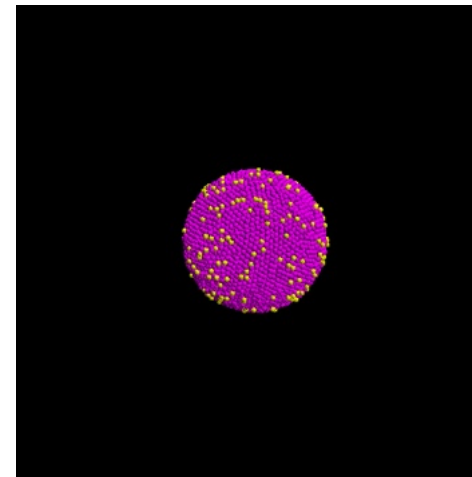
↓
力 $F(t)$ の計算

↓
新しい位置 $r(t + \Delta t)$
新しい速度 $v(t + \Delta t)$

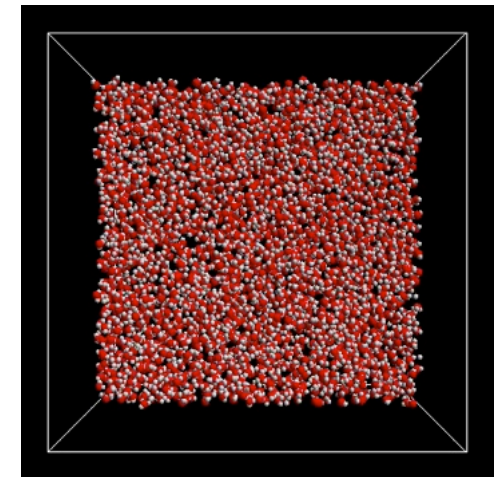


これを繰り返し，分子の時間変化を記録する

MDシミュレーションの例 (c) 泰岡研究室



クラスターの断熱膨張



気泡生成の初期過程

- 実験では観測困難な現象（微小時間・空間）
- 実験困難な条件下の現象（超低温，超高压 etc.）

分子の運動を**ダイレクト**に可視化可能



2. 分子シミュレーション@慶應理工

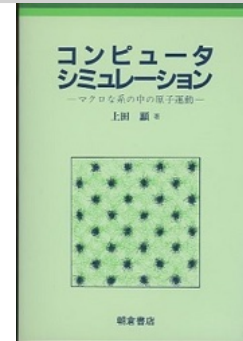
国内における分子シミュレーションの歴史

始まりは京大

- 上田顕先生が分子動力学法を日本に輸入
- 米沢富美子先生, 能勢修一先生
- Noséの方法を1984年に発表 (仕事は1983年)

舞台は慶應理工へ

- 1981年 米沢先生 着任 (助教授), 1984年 能勢先生 着任 (助手)
- 物理: 高野宏先生 (名誉教授), 光武亜代理先生(明大)
- 物情: 横井康平先生, 渡辺宙志先生
- 機械: 泰岡顕治先生, 村松真由先生
佐藤碧海先生
- 化学: 畑中美穂先生, 稲垣泰一先生
- SD: 山本詠士先生 など



上田, 朝倉書店 (1990)

育児しつつ、世界的研究「子連れ女性学者」、凄い生涯
女性初の日本物理学会会長「米沢富美子」の偉業



東洋経済 (2023)



Nosé, JCP (1984)

30人以上の博士を輩出
大学や研究所などで活躍

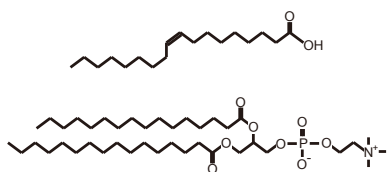
慶應理工は分子シミュレーション分野を
発展・牽引してきた重要拠点



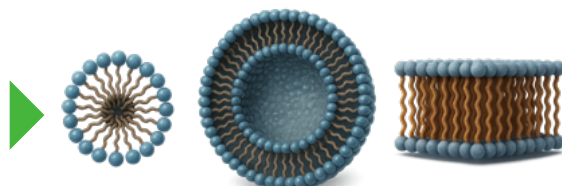
2. ソフトマターの困難再登場@分子シミュレーション

■ **材料内部の多階層性** → 幅広い時空間スケールの現象を考慮しなければならない

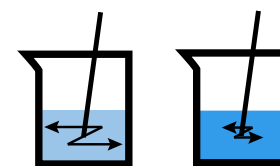
分子構造 (Å~nm)



分子集合体 (100 nm~μm)



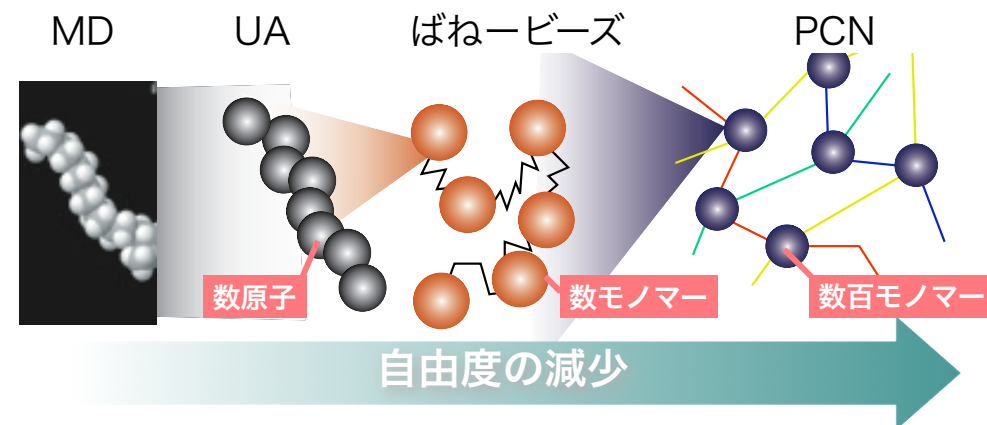
物性・機能性 (~1 mm)



低分子系とは異なる特徴

- ✗ 分子そのものが巨大（分子量数万以上）
→ 分子集合体は・・・
- ✗ 多くの現象で特徴時間が長い（数千秒に達するものも）
→ 長時間計算が必要・・・

- ◎ 様々な現象に独特の**普遍性**（化学種を問わないスケーリング則）がある！

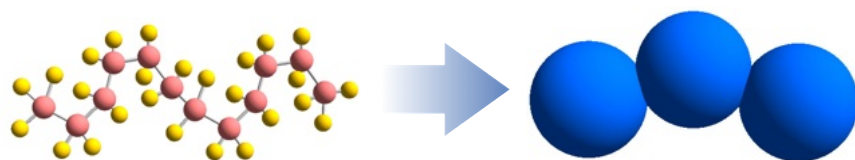


“粗視化”によって分子描像を
保持したままソフトマターの計算



2. 粗視化（モデリング）

■ 粗視化(モデリング) = 物理的本質を抽出する



ソフトマター(高自由度の系)

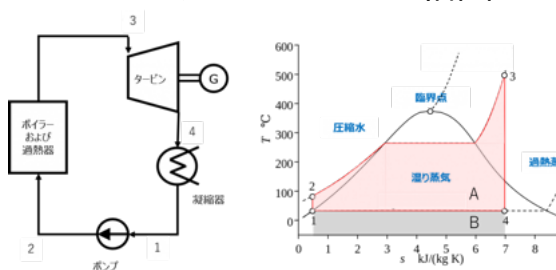
- 自由度が減少. 計算コストが減り, 大きな時空間スケールの現象が再現可能
- **不要な自由度を削減. 現象の本質を顕にできる可能性**

設備・製品



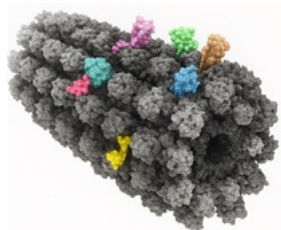
本質を抽出

エネルギーサイクル・相図



仕事・エネルギー効率
の本質を抽出

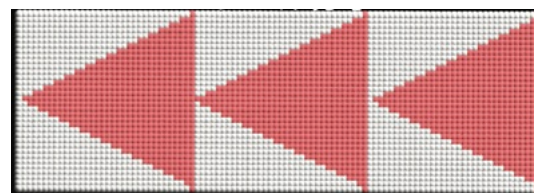
生体機械: 分子モーター



高効率で
体中に物質を運搬

様々なタンパク質
から構成される

本質を抽出



疎水性相互作用する板として表現

ACS Nano (2010, 2021), JACS (2013) etc.

“粗視化”によって
機能性の本質を解明



3. AI活用(機械学習)で何ができるようになる？

■ “機械学習”×“分子シミュレーション”で もう実験は不要？

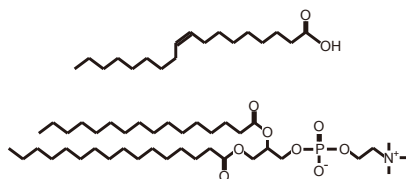
- ・ 月刊化学, “実験はもう不要？ in silicoな製品開発にむけて”, 77 (6), 68-69 (2022).
- ・ オレオサイエンス, “分子シミュレーションと機械学習を活用した界面活性剤水溶液の構造・物性予測”, in press (2025).
- ・ 洗浄に関するシンポジウム, “分子シミュレーションと機械学習を組み合わせた界面活性剤水溶液の物性予測”, 東京都江戸川区 (2024).
- ・ 日本化学会技術シンポジウム, “機械学習”×“分子シミュレーション”で もう実験は不要？～in silicoの活用によるサステナブルな素材開発に向けて～, (2024).
- ・ 実験の自動化・自律化によるR&Dの効率化と運用方法, 情報技術協会, 第7章5節(2023), etc.

ソフトマター

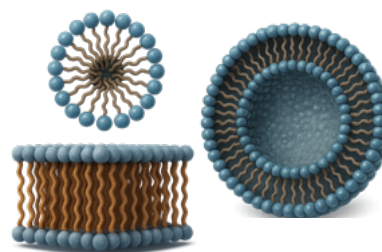
分子シミュレーション

AI活用
機械学習

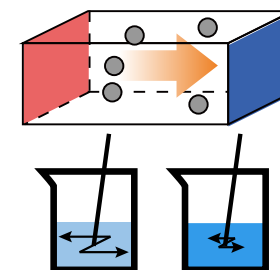
分子構造 (Å~nm)



分子集合体 (100 nm~μm)



物性 (~1 mm)



感性・機能性



分子シミュレーション技術でsmoothにつながる

$$F = m \frac{d^2 r}{dt^2}$$



AI(機械学習)と組み合わせ

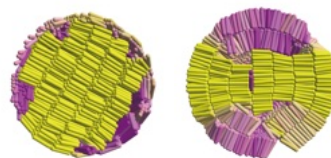
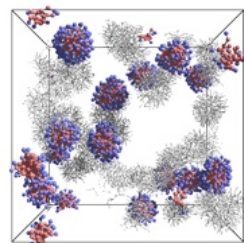
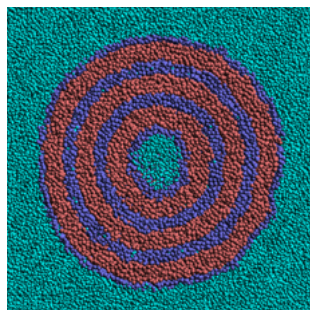
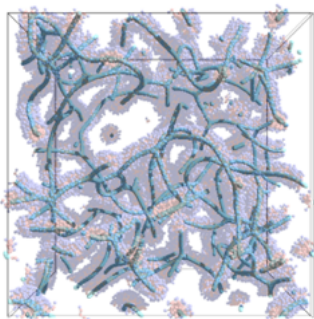


分子設計から感性・機能性まで
一気通貫でできるようになる

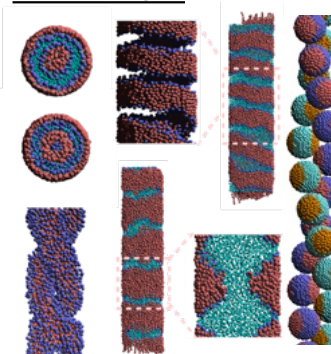


これまでの研究: ソフトマターの多様性

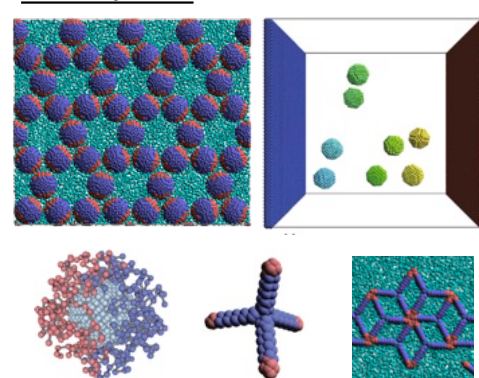
ミセル, ベシクル



ナノ空間



ナノ粒子

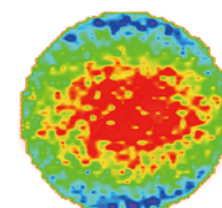
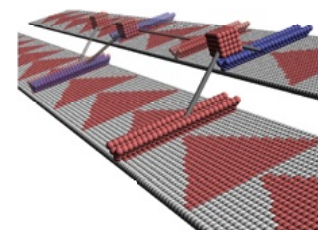


ソフトマター

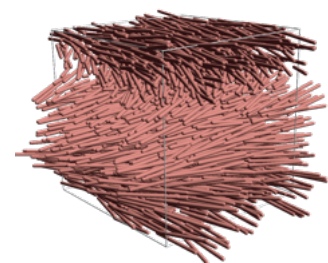
分子シミュレーション

AI活用
機械学習

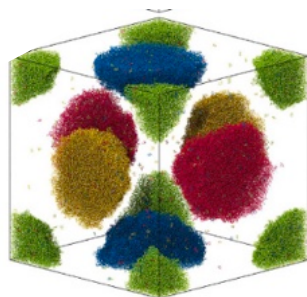
分子モーター・アクティブマター



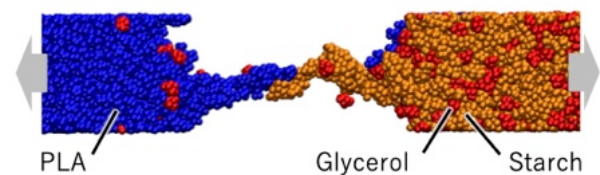
液晶



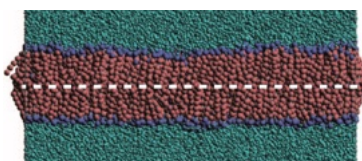
エマルション



高分子



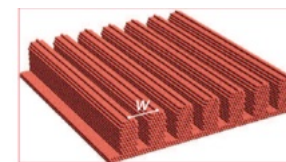
生体膜

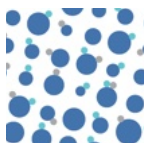


生体分子



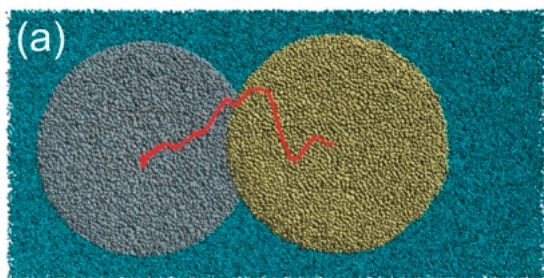
界面





塾内拠点との共同研究

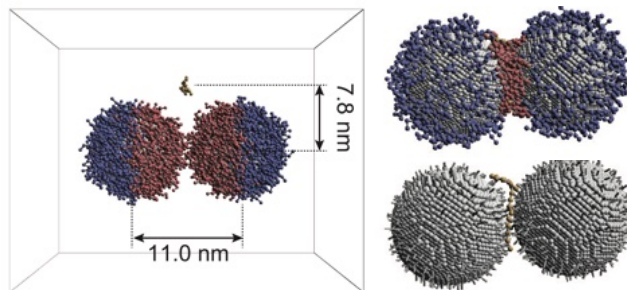
14/18



応化・伴野G

油滴の自己駆動の分子論的起源

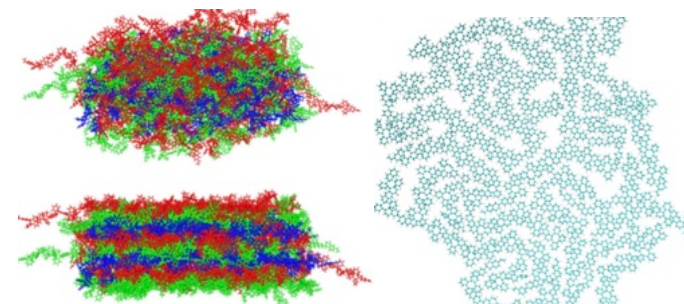
MSDE (2024), *J Mol Liq* (2025), *Nanoscale* (2025) etc.



電情・斎木G, SD・山本G

高分子グラフトナノ粒子のセンサー

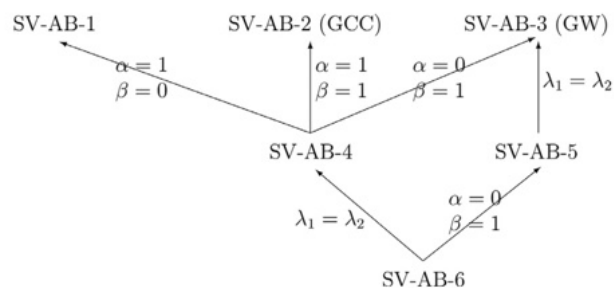
Int J Mol Sci (2022)



応化・緒明G

アモルファス二次元材料の提案

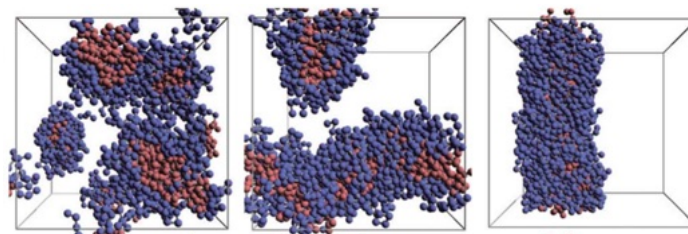
JACS (2025)



機械・彭G

確率的ハミルトニアン数値積分法の提案

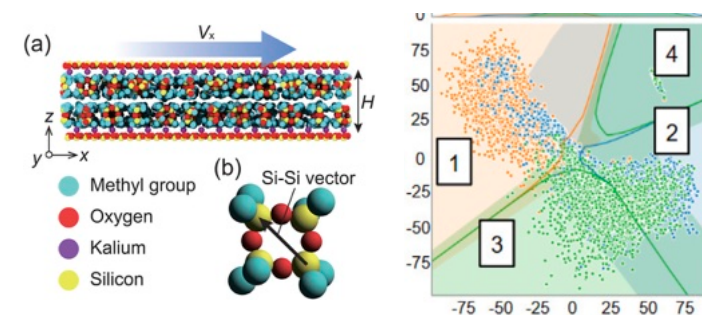
Appl Math Comput (2022)



機械・堀田G

ペプチド両親媒性分子の自己集合

RSC Adv (2018)



機械・泰岡G

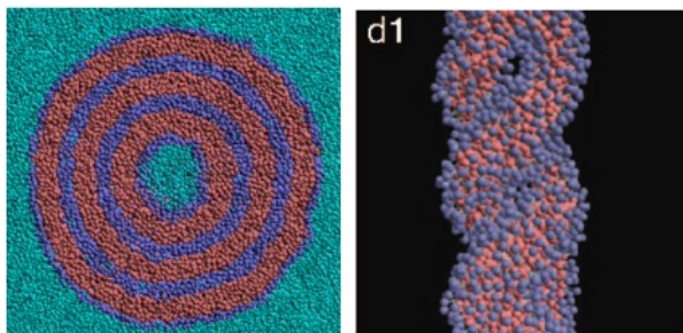
機械学習を用いた構造分類

Next Res (2025), *Comm Chem* (2024), *ACS AMI* (2023) etc.



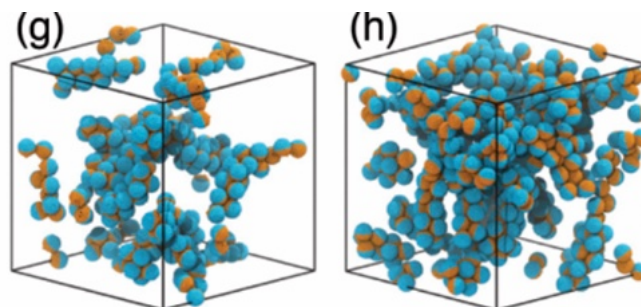
学外拠点との共同研究

15/18



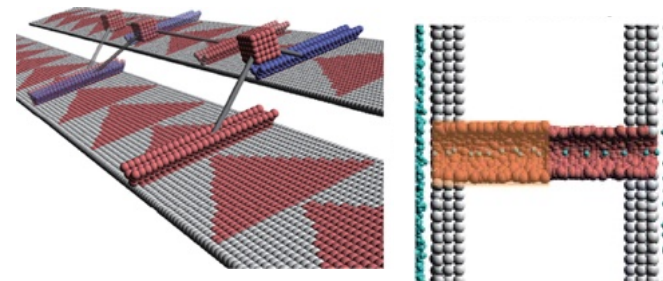
米・ネブラスカ大
(Prof. X.C. Zeng)

JACS (2008, 2013), *ACS Nano* (2013),
Nanoscale (2013), *JCTC* (2013) etc.



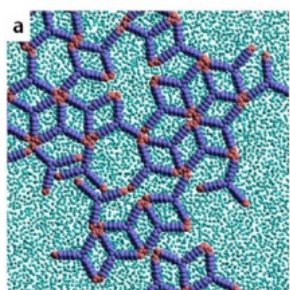
独・マインツ大, ライプニッツ研
(Prof. A. Nikoubashman)

Soft Matter (2020, 2023), *Langmuir* (2020)



理研 (Dr. T. Ebisuzaki),
福井大 (Prof. T. Koishi)

ACS Nano (2010, 2021), *JACS*
(2013), *Nanoscale Horiz* (2023) etc.



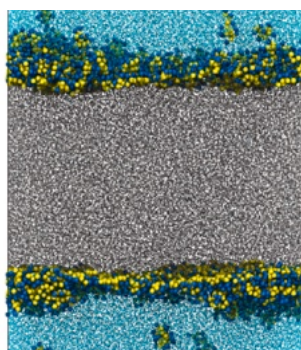
NAIST (Prof. T. Nakashima)

ACS Nano (2017), etc.



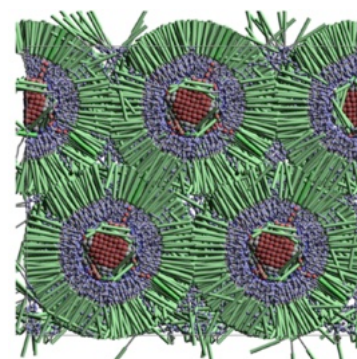
伊・ミラノ工科大学
(Prof. A. Gautieri)

RSC Adv (2023)



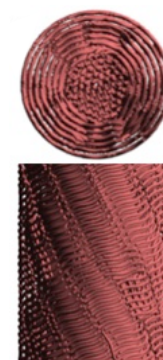
京都工繊大
(Prof. Y. Kobayashi)

J Mol Liq (2024), etc.



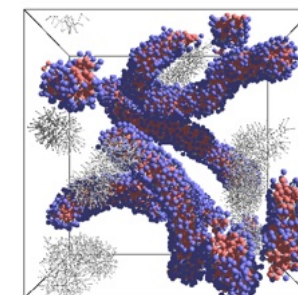
東大 (Prof. Y. Ito)

Chem Sci (2024)



産総研 (Dr. K.Z. Takahashi)

PRE (2024) etc.



農工大 (Prof. Y. Masubuchi)

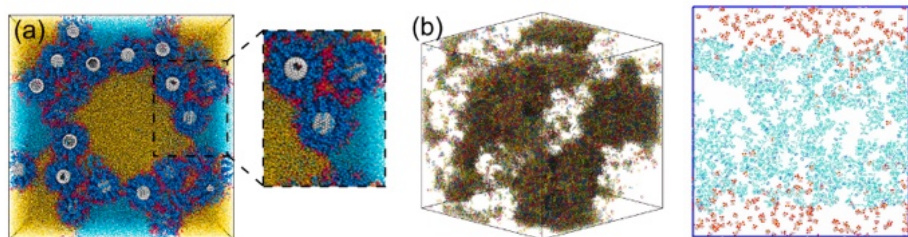
JCP (2007)

神大
(Prof. Y. Yamashita)
愛工大
(Prof. M. Hattori)
など

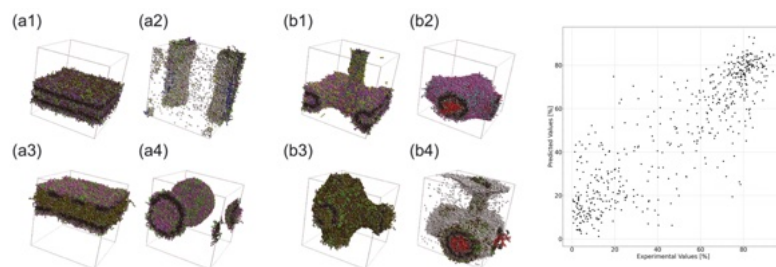


企業との共同研究: 5年間(強)の答え合わせ

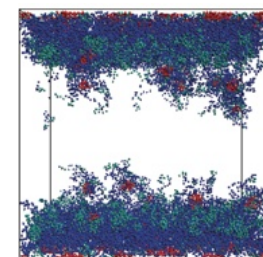
■ ソフトマターの分子シミュレーション ～分子シミュレーション工学を**目指して**～



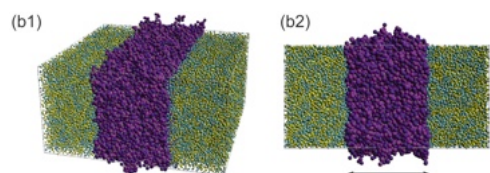
キリン (ピッカリングエマルジョン, 抗菌高分子シート)



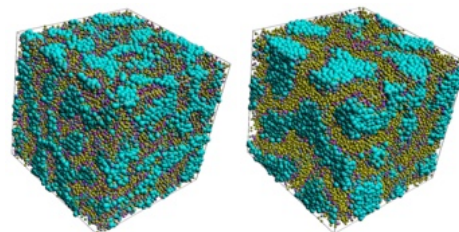
ファンケル・キリン (クレンジング剤の性能予測)



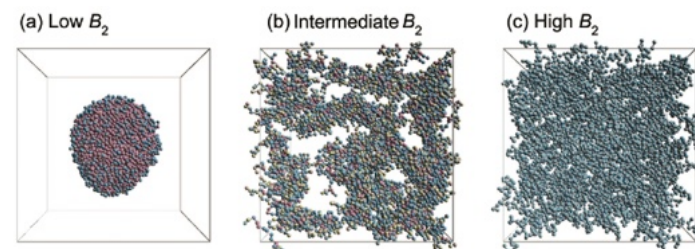
ライオン
(洗剤の分子設計)



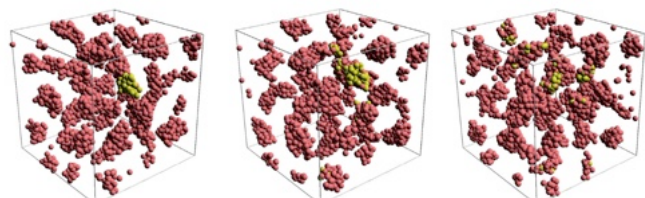
デンソー (高分子膜の水透過性)



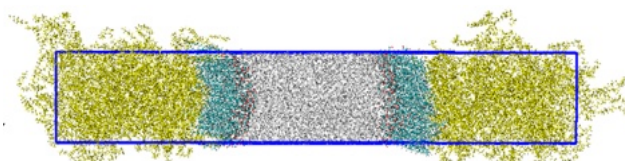
日清オイリオ (エステル油の抱水性)



トヨタ (高性能界面活性剤の予測)



東亜合成 (ブロックコポリマーの緩和)



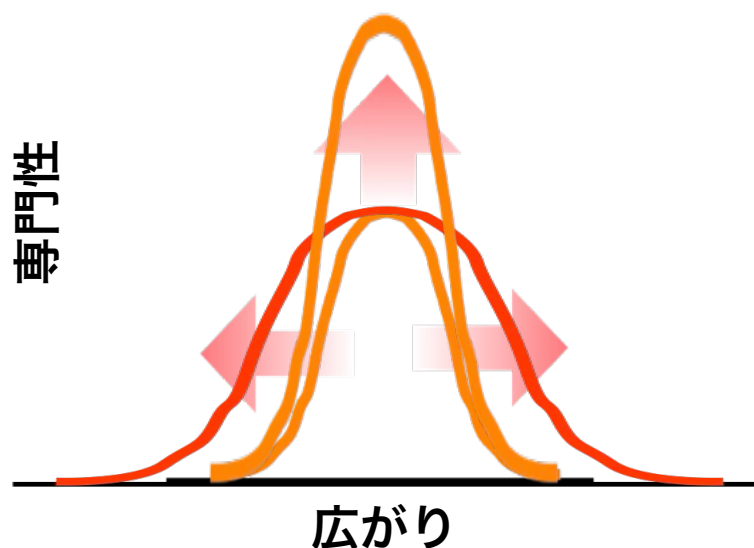
雪印メグミルク (油の飽和度の影響)

など

分子シミュレーション工学の**深化**



■ 先鋭と裾野



分子シミュレーション工学の
Sustainable Development

● 分子シミュレーション研究創発センター (MolSim Cener)

理工学研究科の研究ユニット・タイプA

泰岡(M), 渡辺(I), 畑中(K), 村松(M), 彭(M), 山本(SD),
稲垣(K), 佐藤(M), 平野(M), Brumby(M), 浅井(KGRI),
博士課程16名, 総勢42名



● SMECS

(Soft Material × Engineering × Computer Simulation)

ソフトマターの理論と社会実装の橋渡し

兵庫県立大, 関西大, 神戸大, 東京大, 京都工繊大, 慶應大
三菱ケミカル, 東洋紡, 日立



● アクティブマター研究ユニット

理工学研究科の研究ユニット・タイプB

マルチスケール & 非平衡過程現象への挑戦
伴野(C), 斎木(E), 鈴木(L)





謝辞

18/18

■ Connecting the dots ~ Steve Jobs

研究室メンバー

山口(D3) 大里(M2) 神庭(B4)
濱口(D3) 叶 (M1) 小倉(B4)
山田(D1) 佐藤(M1) 董 (B4)
孟 (D1) 陳 (M1) 山崎(B4)
三譯(D1) 星野(B4)
按田(D1) 谷 (B3)

卒業生・修了生

小林 (2021博士修了) 五明(2020学部卒業)
佐藤 (2025博士修了) 山本(2020学部卒業)
荒木 (2021博士中退) 森田(2021学部卒業)
辻之上(2021修士修了) 谷 (2022学部卒業)
酒井 (2023修士修了) 松元(2023学部卒業)
佐々木(2024修士修了) 須藤(2024学部卒業)
横山 (2024修士修了) 波佐(2024学部卒業)
石渡 (2025修士修了) 中村(2024学部卒業)
鈴木 (2025修士修了)



慶應義塾大学(学生時代), 近畿大学, 電気通信大学と一緒に過ごしたメンバー, 家族に感謝いたします