

## B3-02 計算科学による水圏機能材料の設計

鷺津仁志（兵庫県大院シミュ, 京大 ESICB）

水圏における材料シミュレーション<sup>1)</sup>においては、材料と水の混合状態における構造と動態を知るとともに、高分子やイオンを含む階層的な構造により機能発現するため、水分子から材料のマクロな構造までつなげることが必要である。我々<sup>2)</sup>は新学術領域「水圏機能材料」（領域代表：加藤隆史東大教授）において、量子から流体レベルまでの分子シミュレーション技術を統合することで、分子論的な立場から水圏機能材料の構造と機能を解明し、分子・材料の制御・高機能化を実現することを目指している。

濃厚状態にある材料の分子動力学パラメータを量子論的に決定する手法<sup>3)</sup>を用いて、東大加藤らによるイオン機能液晶膜<sup>4)</sup>の解析に適用した。ジャイロイド、カラムナーの構造の再現に成功し（Fig. 1）、水分量の増加による状態変化を解明した。また、東大原田らによる XES スペクトルに対応した各種イオンの水和構造を分子動力学により同定した。九大田中らによる生体適合材料、阪大高島らによるホスト-ゲスト分子についても、分子動力学モデルを作成し（Fig. 2）、水環境下の機能発現について解析している。

また、マルチスケールシミュレーション手法の構築、すなわち散逸粒子動力学<sup>5)</sup>と分子動力学、ブラウン動力学と格子ボルツマン法<sup>6,7)</sup>（Fig. 3）による連成解析プログラムを構築・改良中であり、各種の水圏機能材料の実験系の解析に適用予定である。

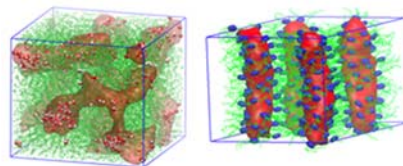


Fig. 1. Snapshots of bicontinuous cubic (left) and hexagonal columnar (right) phases of Ionic Liquid Crystal.

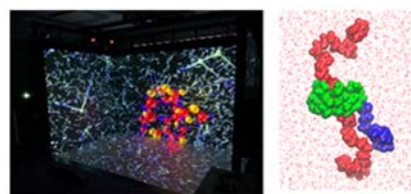


Fig. 2. MD simulation models of poly(2-methoxyethylacrylate) (left) and polyethylene glycol- $\alpha$ CD complex (right) in aqueous solution.

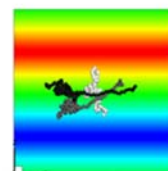


Fig. 3. Polymers under shear calculated by the multi-physics simulator.

- 1) 鷺津仁志, 分子シミュレーションによりわかる材料表面の水の構造と動態, *トライボロジスト* (印刷中) .
- 2) <http://aquatic-functional-materials.org/>  
計算物理学：渡辺豪（北里大理），高分子物理学：樋口祐次（東大物性研），分子シミュレーション：鷺津仁志（兵庫県大院シミュ）
- 3) Y. Ishii, N. Matubayasi, *J. Chem. Theory Comput.*, **2020**, *16*, 651.
- 4) T. Kato, M. Yoshio, T. Ichikawa, B. Soberats, H. Ohno, M. Funahashi, *Nature Rev. Mater.*, **2017**, *2*, 17001.
- 5) T. Kinjo, H. Yoshida, H. Washizu, *Colloid Polym. Sci.*, **2018**, *296*, 441.
- 6) H. Yoshida, T. Kinjo, H. Washizu, *Chem. Phys. Lett.*, **2019**, *737*, 136809.
- 7) 鷺津仁志, 高分子材料のトライボロジー制御, *技術情報協会*, **2020**.

### PROFILE

鷺津仁志(兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究所, 京都大学触媒電池元素戦略拠点)

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻博士課程修了, 博士(学術)。(株)豊田中央研究所を経て現在, 兵庫県立大学教授, 京都大学拠点教授. 分子シミュレーションによる界面の物理化学現象の研究に従事. 2004年日本トライボロジー学会奨励賞受賞. *Molecular and Colloidal Electro-optics, Surfactant Science 134*, CRC Press, 2006, 共著. 日本トライボロジー学会理事, 分子シミュレーション学会幹事, 高分子学会, アメリカ化学会などに所属. 趣味は作曲・チェロ演奏・水泳. URL: <http://washizu.org/lab/>