

A2-06 計算科学による水圏機能材料の解析と分子設計

鷺津仁志¹ (兵庫県大院情報¹)

水圏機能材料における水分子の役割を理解するためには、水分子から材料のマクロな構造までつなげて理解することが必要である。我々は新学術領域「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・高機能化の実現に資するシミュレーションを実施してきた。

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を用いて、東大加藤らによるイオン液晶膜の解析を行い、水分量の増加による状態変化を解明した¹⁾(Fig. 1)。また、九大田中らによる生体適合材料²⁾、阪大高島らによるホスト-ゲスト分子³⁾についても、分子シミュレーションを実施し、水環境下の機能発現について解析した。さらに、液晶に関して新規材料のモデリング・解析手法の提案を含む様々な研究を班間連携で実施した⁴⁻⁶⁾。他には、固体表面におけるロタキサン⁷⁾、キトサン⁸⁾など高分子周辺の水の構造や、水を含む酸化グラフェンのせん断挙動なども初めて分子レベルで明らかにした(Fig. 2)。マルチスケールシミュレーション手法の構築、すなわち粗視化粒子動力学⁹⁾、ブラウン動力学と格子ボルツマン法¹⁰⁾による連成解析プログラムを構築し、生体分子を含む各種の水圏機能材料の解析に適用した。いずれの解析においても、従来実験に基づいて提案されてきた水素結合の様態や水分子の分類に関して、さらに詳細な理解に至った。

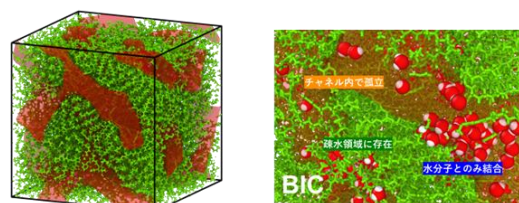


Fig. 1. Snapshots of bicontinuous cubic phase of Ionic Liquid Crystal (left) and state of water molecules (right).

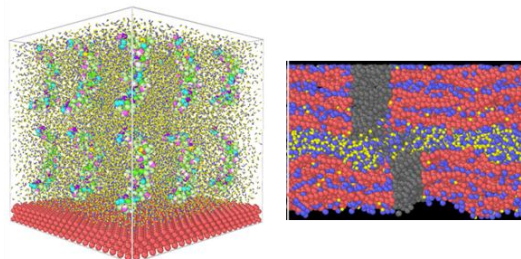


Fig. 2. Snapshots of MD simulation of Chitosan aqueous solution confined between gold plates (left) and sliding simulation of Graphene oxides (right).

- 1) Y. Ishii et al., *Sci. Adv.*, **2021**, 7, eabf0669.
- 2) Y. Ikemoto et al., *J. Phys. Chem. B.*, **2022**, 126, 4143.
- 3) Y. Kawai et al., *NPG Asia Mater.*, **2022**, 14, 32.
- 4) Y. Ishii, *J. Phys. Chem. B.*, **2022**, 126, 4611.
- 5) K. Hamaguchi et al., *ChemPhysChem*, **2023**, 24, e202200927.
- 6) K. Takemoto et al., *J. Chem. Phys.*, **2022**, 156, 014901.
- 7) Le Nhu Minh Tue, H. Washizu, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2022**, 24, 30035.
- 8) Le Nhu Minh Tue, Le Van Sang, H. Washizu, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2022**, 24, 2176.
- 9) Le Van Sang et al., *ASME. J. Tribol.* **2022**, 144, 011901.
- 10) H. Yoshida, T. Kinjo, H. Washizu, *Chem. Phys. Lett.*, **2019**, 737, 136809.

PROFILE

鷺津仁志 (兵庫県立大学大学院情報科学研究科)

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, 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, 分子シミュレーション学会, 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/>