

兵庫県立大学  
データ計算科学連携センター  
2022年度 利用報告書集

Annual Report  
Center for Cooperative Work on  
Data science and Computational science  
April 2022 - March 2023



兵庫県立大学  
University of Hyogo

# 油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明

山本 周平, 遠藤 聡太, 神尾 和教,

尾嶋 拓<sup>A</sup>, 石井 良樹<sup>A</sup>, ハーजूー コーサー<sup>A</sup>, 富山 栄治<sup>A</sup>, 鷲津 仁志<sup>A</sup>

三井化学株式会社, 兵庫県立大学大学院情報科学研究科<sup>A</sup>

(世話人: 兵庫県立大学大学院情報科学研究科 鷲津 仁志 教授)

地球温暖化防止のため、自動車や建設機械をはじめとする産業機械では CO<sub>2</sub> 排出量の低減を目的にエネルギー効率の向上が一層強く求められており、潤滑油による潤滑機械の省燃費化は重要な技術として期待されている。近年、液状オレフィンコポリマー (L-OCP) を粘度調整剤とした作動油では、循環を妨げる副次流の発生が少なくエネルギー効率で優位に作用することが報告<sup>1), 2)</sup> されており、本研究では同現象のメカニズム解明のため、粘度調整剤が及ぼす流体への影響に着目し、マルチフィジックス・シミュレーションを用いて L-OCP とポリメタクリレート (PMA) の流体中での挙動を解析した。

本シミュレーションは、基油構成分子それぞれの運動は考慮せず連続する流体場として格子ボルツマン法で、モノマー単位を一つの仮想粒子として粗視化させた粘度調整剤ポリマー分子の動きをブラウン動力学でそれぞれ計算し、両者を連成させるハイブリッドシミュレーション手法<sup>3), 4)</sup> により解析を行った。ポリマーは 64 粒子×4 ポリマーを解析系内に配置させ、PMA を模したポリマーには 4 粒子毎の 1 粒子に極性基として 3D の双極子モーメントを与えた。格子間隔 1.0 nm の構造格子にて、時間刻み 5 fs で 1×10<sup>6</sup> ステップ計算し、せん断速度は 100, 1 m/s で実施した。

L-OCP, PMA それぞれを解析系内に配置してシミュレーション解析を行った結果を Fig. 1, 2 に示した。高せん断速度域では明確な差異が見られなかった一方で、低せん断速度域では、L-OCP, PMA 間で流動場へ及ぼす影響が大きく異なることが認められた。低せん断速度域において、PMA は分子内の双極子-双極子相互作用により分子が縮むのに対し、L-OCP は極性基を有さないため X 軸方向の流れに沿って拡がり、同時に Y 軸方向の流れの伝播を抑制する効果があらわれたことに由来すると考えられる。

本マルチフィジックス・シミュレーション解析により、L-OCP, PMA 間で流体中での分子の伸縮挙動が異なることが明らかとなり、これにより L-OCP 処方作動油がエネルギー効率の点で優位に作用している可能性について言及した。昨年度報告<sup>5)</sup>した金属壁面への吸着挙動と併せて、L-OCP は副次流の発生および伝播抑制の両面で効果があることが示唆された。

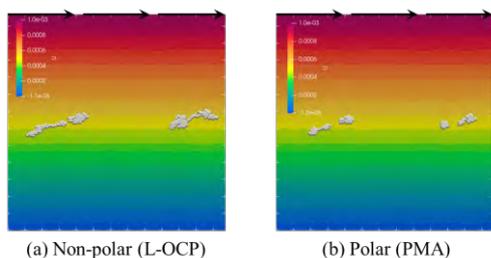


Fig. 1 Snapshots of polymer behavior, fluid flow at high shear velocity (100 m/s)

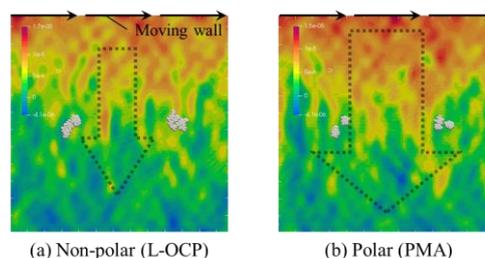


Fig. 2 Snapshots of polymer behavior, fluid flow at low shear velocity (1 m/s)

## 文献

- 1) M. Moon: *Lubes 'n' Greases*, 25 (No. 10), 20 (2019) 34.
- 2) I.K. Karathanassis, et al.: *J. Nonnewton. Fluid Mech.* 275, (2020) 104221.
- 3) H. Yoshida, T. Kinjo & H. Washizu: *Chem Phys. Lett.* 737 (2019) 136809.
- 4) 澤井・Deboprasad・鷺津, 潤滑油中の粘度指数向上剤の動的挙動解析, 日本機械学会 2021 年度年次大会予稿集, S071-01.
- 5) 山本・遠藤・神尾・石井・Deboprasad・Khajeh・沢井・河北・富山・鷺津, :油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明, 兵庫県立大学データ計算科学連携センター2021 年度利用報告書集, 14-16.

## 学会発表

山本 周平, 神尾 和教, 遠藤 聡太, 尾嶋 拓, 石井 良樹, ハーजूー コーサー, 鷺津 仁志, ” 油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明”, トライボロジー会議 2022 秋 福井, 11. 11 (2022).

# SCALE-SDM による PI Chamber 再現数値実験サポート

高橋 伸吉

東京コンピュータサービス株式会社 神戸支店 システム部

(世話人：島 伸一郎 准教授)

島准教授が中心となって開発した、「超水滴法(Super-Droplet Method, SDM)」とは、大気中の雲・エアロゾル・降水粒子の運動と変化を、確率的な粒子法を使って統一的に計算する方法である。

超水滴法の特徴として、原理的な物理法則に基づいて粒子群の状態変化を計算することが出来、また、同等の精度を持つ既存の手法に比べ速く計算できる事が理論的に示唆されている。

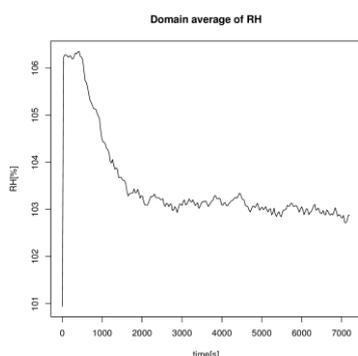
今回は、最先端の手法である超水滴法を、次世代の大型計算機で性能が出る SCALE ライブラリの力学コア上に実装したプログラムである「SCALE-SDM」を用いて、以下の各作業を実施した。

1. PI Chamber (ミシガン工科大学に設置されている雲生成チャンバーの名称) 再現数値実験の高解像度化 エアロゾル投入実験
2. リポジトリの更新(必要な場合)

1の作業は、前年度の作業結果を利用して、空間の解像度(グリッド)を、6.25cm 立方より 3.125cm 立方に高解像度化して再現数値実験を行った。

1の作業に先立って、初めにエアロゾルを注入しない条件の下で、側壁の湿度を 68.5%(前年度に決定)の条件で数値実験を実施し、定常状態で相対湿度が 103%近くになることを確認した。

下の図は、経過時間(横軸)と領域内の相対湿度(縦軸)のグラフであり、側壁の湿度設定を 68.5%に設定した結果である。2000 秒付近以降、領域内の相対湿度が 103%前後で安定している様子が見て取れる。



エアロゾルを注入する条件で再現数値実験を実施した。エアロゾル投入率毎に数値実験を実施しており、計 7 種類(N=1,10,50,100,500,1000,1500)の条件による数値実験を実施した。

2の作業は、数値実験の各データをクリアするシェルに対して、SD\_selected\_history ファイル(プロセッサ NO 単位で出力される)をクリア対象に含めるように修正し、所定の Bitbucket リポジトリにコミットした。

# 分子シミュレーションによる PHBH の結晶化に関する研究

小田 望<sup>A</sup>, 岡本隆一<sup>B</sup>

株式会社カネカ Material Solutions New Research Engine Planning Team<sup>A</sup>

兵庫県立大学大学院情報科学研究科<sup>B</sup>

(世話人：鷲津 仁志 教授)

生分解性ポリマーとして知られている PHBH (3-ヒドロキシブチレート-co-3-ヒドロキシヘキサノエート重合体) は昨今盛んに研究されているが、その結晶化機構の詳細については解明されていない。本研究では分子動力学シミュレーションを用いて、PHBH の結晶化過程や結晶化における重要因子を特定することを目的とする。

はじめに、力場パラメータを GAFF, 電荷パラメータを Gaussian16 による量子化学計算で得られた RESP 電荷とした全原子分子動力学シミュレーションを GROMACS により実施した。結晶化温度以下においても効率的なサンプリングを行うためにレプリカ交換法を適用し、各コンフォメーションでの安定状態を評価した。次に、結晶化構造のモデルを作成し、結晶構造と準安定構造のコンフォメーション間の反応座標について、アンブレラサンプリングと重み付きヒストグラム解析法(WHAM)を用いることで、平均力ポテンシャルを作成した。また、アンブレラサンプリングの各拘束条件下での部分構造間の相互作用を詳細に分析することで、結晶化に及ぼす因子について考察した。

今後は結晶構造と非晶構造が共存する系の分子動力学シミュレーションなどを実施し、さらなる結晶化機構の解明を進めていく計画である。

## 第2回アカデミアインターンシップ～可動性架橋の形成におけるシミュレーション解析～

西田 幸輝<sup>A</sup>、以倉 峻平<sup>A</sup>、高島 義徳<sup>ABCD</sup>、鷲津仁志<sup>E</sup>

大阪大学大学院理学研究科<sup>A</sup>、大阪大学高等共創研究院<sup>B</sup>、大阪大学フォアフロント研究センター<sup>C</sup>、  
大阪大学先導的学際研究機構<sup>D</sup>、兵庫県立大学大学院情報科学研究科<sup>E</sup>

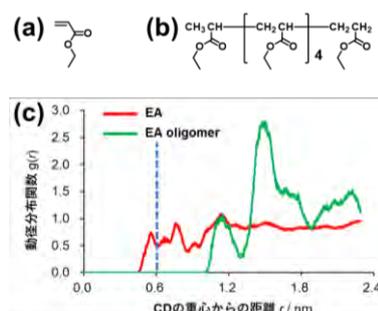
(世話人：鷲津 仁志、石井 良樹、田尾 綾香)

**<緒言>** 当研究グループは、適切なサイズの主鎖モノマーとシクロデキストリン (CD) モノマーの無溶媒共重合により、主鎖が CD 環を貫通した可動性架橋を形成することを見出した<sup>1,2</sup>。また、CD 修飾直鎖高分子存在下で別種の主鎖モノマーの無溶媒重合により、可動性架橋で異種主鎖ポリマー間をつないだ高分子材料を作製した<sup>3</sup>。本研究では可動性架橋の形成メカニズムを調査するため、分子動力学シミュレーション (MD) 解析を行った。

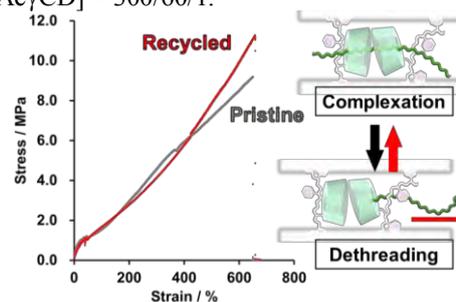
**<結果・考察>無溶媒重合過程の包接挙動の解析** アクリルアミド重合基修飾アセチル化  $\gamma$ CD (PAC $\gamma$ CD) が中心に1個配置したセルに主鎖モノマーのポリエチルアクリレート (EA) および生長鎖としての EA 6 量体オリゴマーを配置して MD 解析を行った (Fig. 1)。PAC $\gamma$ CD の重心からの距離  $r$  に対する動径分布関数を算出し、空孔サイズにあたる  $r = 0.6\text{nm}$  の中を「包接」と扱う。EA600 個導入したモデルでは EA の PAC $\gamma$ CD への包接が観測された。一方、EA 5 量体オリゴマー120 個導入したモデルでは全く包接されなかった。EA300 個と EA 6 量体オリゴマー60 個を混合した系でも同等の傾向が見られた。この結果より、生長中のポリマーを後から PAC $\gamma$ CD 環が認識して包接する可能性は低く、先に包接された EA が重合することで可動性架橋を形成した可能性が高いことが示唆された。

**無溶媒重合過程の包接挙動の解析** PAC $\gamma$ CD 修飾ポリスチレンの環を EA 鎖が貫通した可動性架橋異種高分子複合材料は THF に溶解可能であり、溶媒留去によるフィルム化によって元の力学物性をほぼ取り戻した (Fig. 2)。NOESY-NMR 測定結果から溶解時に脱離した EA 鎖が溶媒留去時に再び包接されることを確認した。まずは溶解挙動を確認するため、溶媒 THF300 個と EA 6 量体オリゴマー50 個導入したモデルで解析したところ、THF が非常に包接されやすいことが明らかになった (Fig. 3a)。再包接挙動の確認を試みるにあたり、EA 6 量体オリゴマー単体では前述の通り包接されないため、少量の THF がオリゴマーの包接を助ける可能性を考えた解析を行った。そこで THF80 個と EA 5 量体オリゴマー112 個導入したモデルで解析した結果、EA オリゴマーも THF も全く包接されなかった (Fig. 3b)。この結果ではオリゴマーの再包接を再現することはかなわなかったものの、乾燥過程で THF の包接が解離することは示唆された。今回は PAC $\gamma$ CD が1分子での解析であったが、PAC $\gamma$ CD が数個レベルで凝集しやすい傾向が知られている<sup>4</sup>ことから、複数個の PAC $\gamma$ CD の協働効果が働けばオリゴマーの包接を再現できた異なる傾向を示した可能性がある。

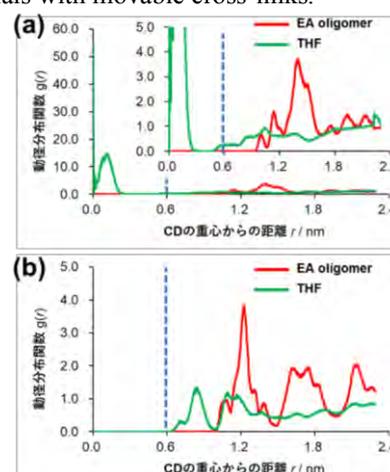
**<参考文献>** [1] R. Ikura, Y. Takashima, et. al., *Macromolecules* **2019**, *52*, 6953-6962. [2] R. Ikura, Y. Ikemoto, Y. Takashima, et. al., *Polymer* **2020**, *196*, 122465. [3] R. Ikura, Y. Ikemoto, G. Matsuba, Y. Takashima, et. al., *Mol. Syst. Des. Eng.* **2022**, *7*, 733-745. [4] Y. Kawai, R. Ikura, Y. Ishii, H. Washizu, G. Matsuba, Y. Takashima, et. al., *Mol. Syst. Des. Eng.* **2022**, *7*, 733-745.



**Fig. 1.** Chemical structures of (a) EA and (b) EA oligomer. (c) Radial distribution function obtained by the MD calculations of  $[EA]/[EA \text{ oligomer}]/[PAC\gamma CD] = 300/60/1$ .



**Fig. 2.** Stress-strain curves of pristine and recycled samples of the dissimilar polymers knitted materials with movable cross-links.



**Fig. 3.** Radial distribution function obtained by the MD calculations of  $[EA \text{ oligomer}]/[THF]/[PAC\gamma CD] =$  (a) 300/50/1 and (b) 112/80/1.

# Amsterdam Modeling Suite を使った ReaxFF 力場の作成

濱野藍<sup>B</sup>, 鷲津仁志<sup>A</sup>

兵庫県立大学大学院情報科学研究科, 兵庫県立大学データ計算科学連携センター<sup>A</sup>

出光興産株式会社<sup>B</sup>

(世話人: 鷲津仁志)

## 【背景】

リンやイオウ化合物は、潤滑油添加剤として用いられ、摩耗、摩擦低減効果を持つ。これらが摺動表面にてどのような潤滑被膜を形成しているのかは、表面分析や元素分析などにより長年研究されてきたが、その詳細なメカニズムは明らかにされてこなかった。分子動力学シミュレーション (MD) は、原子並びに分子の運動方程式をコンピュータ上にて数値的に解き、原子・分子の位置や速度、エネルギーなどの時間変化を可視化する手法である。原子 (粒子) に働く力をポテンシャル (力場) として表現することで、物理的な運動を再現することが可能である。しかしながら従来の MD は、時間発展における結合解離や生成を表現することができないため、化学反応を含む過程を解析することはできなかった。

## 【目的】

反応分子動力学シミュレーション (反応 MD) のポテンシャルを第一原理計算を元に作成し、潤滑被膜形成に重要な基板表面と添加剤の反応を解析できるようにすることを本研究の目的とした。

## 【結果】

Amsterdam Modeling Suite を用い、ポテンシャルのパラメータとして必要な結合や角度を含む小分子の構造最適化計算及び、スキャン計算を実施し、ポテンシャルの学習データを蓄積した (図 1)。作成した力場を用い、NVT 計算を行った結果、基板表面の酸化状態に応じて添加剤の反応に差が生じることを確認した。今後は添加剤分子の電荷の時間変化や密度変化を解析し、表面での反応を明らかにする予定である。

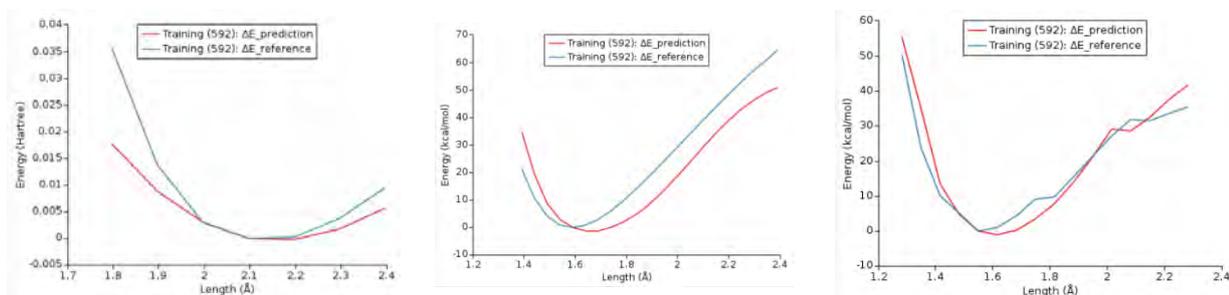


図 1 作成した力場による結合解離曲線 (赤) と学習に用いた第一原理計算による結合解離曲線 (青)

# プラズマ物理に関するシミュレーションの共同研究

西村 征也

量子科学技術研究開発機構 那珂研究所

(世話人：沼田 龍介)

## 1. 研究概要

天体近傍の宇宙空間や磁場閉じ込め装置においては、高温プラズマが背景磁場に磁化された状態にある。このような磁化プラズマにおいては、磁気流体力学的不安定性が発生する。本研究課題においては、(1)オーロラの構造形成の原因となるフィードバック不安定性の新たな解析方法の開拓、(2)トカマクプラズマにおけるバルーニングモード乱流をシミュレーションするコードの開発、の2つに取り組んだ。以下に、それぞれの研究に関する成果を報告する。

## 2. フィードバック不安定性に関する研究成果

電離圏におけるプラズマの揺らぎが磁気圏におけるアルフベン波を励起し、このアルフベン波が電離圏におけるプラズマの揺らぎを増幅する現象をフィードバック不安定性と呼び、オーロラの構造形成を説明するための理論である。近年の研究においては、磁気圏における運動論的效果（集団ではなく個々の粒子の運動に起因する効果）の重要性が指摘されており、速度空間の密度分布関数の発展を記述するジャイロ運動論モデルを用いた解析の必要性が指摘されている。双極子磁場などの非一様性のある地磁気モデルに対してジャイロ運動論モデルを適用してフィードバック不安定性の解析を行なった例は存在しない。そこで、本研究においては、これを実現するための方法論の開拓に取り組んだ。

双極子磁場に沿っては、磁場の大きさ、プラズマ密度、プラズマ温度などが大きく変化するため、数値計算において克服すべき課題が発生する。磁力線に沿って熱速度が大きく変化する系を扱うために、磁力線方向の速度空間に対して不等間隔メッシュを採用した。数値計算負荷の軽減と数値振動の回避のために、磁場勾配に起因するミラー力を近似的に扱う手法を導入した。以上の手法を用いることにより、双極子磁場におけるフィードバック不安定性の安定性解析を行うシミュレーションコードの開発に成功した。初期的な解析からは、ランダウ減衰やミラー力のような運動論的效果が非常に強くフィードバック不安定性の成長率に影響を与え、オーロラの構造を特徴づける空間スケールを変化させていることが観察されている。

## 3. バルーニングモード乱流に関する研究成果

核融合発電の実用化を目指したトカマクプラズマの研究開発においては、プラズマ周辺において発生するバルーニングモード乱流を制御する必要がある。本研究においては、簡約化二流体モデルを用いた非線形非線形シミュレーションコードの改良に取り組んだ。バルーニングモード乱流の発達において、エネルギー保存および角運動量保存が正確に成り立つように、モデル方程式を改良し、また境界条件等の各種設定を行った。

## 学会発表

- [1] 西村征也, “双極子磁場におけるフィードバック不安定性の線形安定性解析”,  
日本物理学会 2022 年秋季大会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 12aW621-8, 9/12 (2022).  
[口頭発表]
- [2] 西村征也, “双極子磁場におけるフィードバック不安定性の線形安定性解析”,  
地球電磁気・地球惑星圏学会第151回総会・講演会, 相模原市立産業会館, S001-35, 11/5 (2022).  
[口頭発表]
- [3] 西村征也, “双極子磁場におけるフィードバック不安定性の線形安定性解析”,  
NIFS共同研究研究会「核融合プラズマの運転制御に関するシミュレーション研究の進展」,  
オンライン開催, 11/30 (2022). [口頭発表]
- [4] 高野歩海, 西村征也, “簡約化二流体モデルの非線形シミュレーションにおける保存則の検証”,  
第32回プラズマ・核融合学会, 年会, 富山国際会議場, 23Pp39, 11/23 (2022). [ポスター発表]

# スーパーパラメタリゼーションにおける集約結合の 集約サイズに対する感度に関する研究

山崎 一哉, 三浦 裕亮<sup>A</sup>  
東京大学大学院 理学系研究科<sup>A</sup>  
(世話人: 島 伸一郎)

スーパーパラメタリゼーションとは、低解像度な全球大気モデル等（親モデル）の各カラムに高解像度な雲解像モデル（子モデル）の独立した計算領域を 1 つずつ結合させ、親モデルでは表現できない積雲対流などの小スケール現象を子モデルに計算させる手法である。通常の全球気候モデルでは積雲対流の効果はパラメタリゼーションと呼ばれる理論的手法で診断するが、スーパーパラメタリゼーションではこれを子モデルによって陽に表現することとなる。これにより、積雲対流の影響が大きい熱帯大気現象の再現性が従来の全球気候モデルより向上する。また、子モデルを鉛直・水平 1 方向の 2 次元に落とすことで、全球を高解像度格子で覆う全球雲解像モデルと比較して計算量を削減可能である。さらに、スーパーパラメタリゼーションは小スケールと大スケールを分離して扱うため、両者のスケール間相互作用を調べるうえで有用なツールとなることが期待される。

このスーパーパラメタリゼーションは、親モデルのカラムと子モデルの領域とが 1 対 1 対応するため、親モデルの解像度が高くなった際に子モデルの担当域が過剰に狭くなることや、子モデルの領域数が増えて計算コストが増加する点が課題であった。そこで我々は、隣接する複数(例: 4×4 個)の親モデルカラムを集約して 1 つの子領域と結合するという集約結合を提案し、これを安定に実行するための手法を構築した。

この集約結合は、複数の親カラムで 1 つの子領域を共有するため、子領域が出力する小スケール現象の影響も複数の親カラムで同一の値を与えることとなり、親モデルの実効的な解像度が低下する可能性が考えられる。そこで我々は、集約する親カラムの個数を変更した複数のスーパーパラメタリゼーションの設定で大気シミュレーションを実行し、各種変数のパワースペクトルを通して実効解像度を比較した。大気数値モデルでは実効解像度より細かいシグナルは適切に取り扱うことができず、これによってスペクトルに折れ曲がりが生じるため、スペクトルが折れ曲がる波長を調べることで実効解像度を比較することができる。その結果、8×8 個までの集約では、折れ曲がり波長ひいては実効解像度への顕著な影響は認められなかった。また、観測値から構築された ERA5 再解析データセットとの比較の結果、4×4 個の集約を行った場合のほうが、従来の 1 対 1 対応に比べてスペクトルが現実に近いことが示唆された。

## 論文

Kazuya Yamazaki and Hiroaki Miura, "Reproducibility of the equatorial Kelvin wave in a superparameterized MIROC. Part I: Implementation and verification of blockwise-coupled SP-MIROC", **Journal of Advances in Modeling Earth Systems**, in prep.

## 学会発表

Kazuya Yamazaki and Hiroaki Miura, "Implementation and Verification of Super-Parameterized MIROC with Blockwise Coupling", JpGU Meeting 2023, 幕張メッセ, 2023年5月(予定). [口頭発表]

# 水中における有機単分子の凝集挙動と水和状態の解析

富依 勇佑<sup>A</sup>, 李 昊<sup>A</sup>, 原田 慈久<sup>A</sup>, 鷲津 仁志<sup>B</sup>

東京大学大学院新領域創成科学研究科 物性研究所 極限コヒーレント光科学研究センター<sup>A</sup>

兵庫県立大学大学院情報科学研究科, 兵庫県立大学データ計算科学連携センター<sup>B</sup>

(世話人: 鷲津 仁志 )

## [緒言]

有機分子の水中における挙動解析は化学反応や生体反応における機能理解や医薬品の設計、センサーの設計など、多岐にわたる研究分野での応用が期待されます。今回、MD シミュレーションによって得られる水溶液環境下における疎水性の有機単分子の凝集挙動を解析することに加え、それらをデータベース化し、分子記述子を取り入れた機械学習を行うことで未知の分子構造に対しての凝集挙動予測ならびに重要度解析を行うことで、水が分子構造に及ぼす影響について考察を試みた。

## [実験結果と考察]

種々の官能基を含み、炭素数 2 から 142 からなる任意の分子を構築、MD シミュレーションにより約 300 種類の真空中および水中での断面回転半径 (Radius of Gyration) を得た (Fig. 1)。Finger Print により生成された分子記述子を説明変数として、機械学習ライブラリである LightGBM を用いたアンサンブル学習によって、RMSE 0.048 と比較的高精度な真空中と水中での有機分子のコンフォメーション変化の定量予測モデルを構築した (Fig. 2)。さらに、本予測モデルを詳細に解析したところ、水中でのコンフォメーション変化に効く重要なパラメータとして、末端官能基よりも主鎖構造の影響が大きく、特に主鎖に含まれる  $-CH_2CF_2-$  ユニットの部分構造が大きな影響を与えることが示唆された (Fig. 3)。

また、本解析で得たデータベースで構築した予測モデルを活用することで、これまで数時間から数日間かけて得ていた物性値を数秒で予測することに成功した。水中での有機分子の物性の予測ならびに考察に対して、MD シミュレーションと機械学習とを組み合わせた分野横断的な本検討は、水圏機能材料アカデミアインターンシップにおいて初の取組みであり、興味深い知見を与えた。

一方超撥水性を示す有機単分子にわずかに親水性の酸素官能基を導入することで水の吸着力をバランスさせ、生体親和性と深い関係を持つ中間水を発現させる研究にも挑戦した。酸素官能基の異なる分子種ごとに、水素結合する水の量を見積もるところまで進んだため、今後これを元に「超撥水生体親和材料」を開発する手がかりとしてゆく予定である。

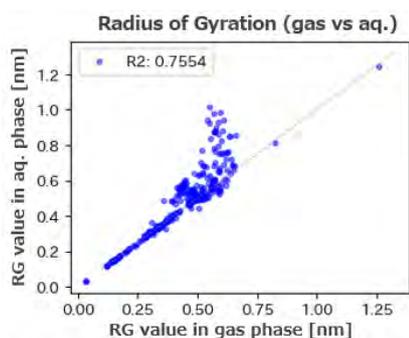


Fig 1. Comparison of Radius of Gyration values between gas phase and aqueous phase.

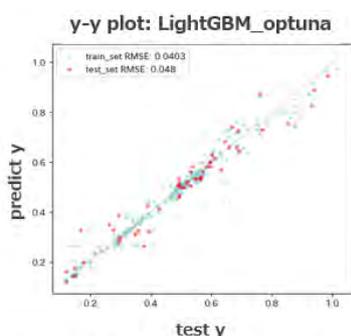


Fig 2. Y-Y plot of LightGBM predictions versus actual measurements.

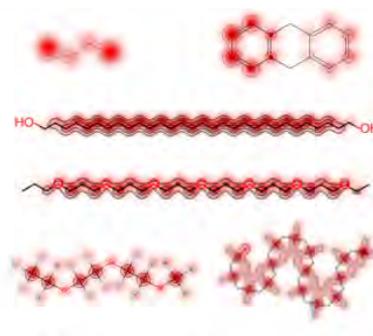


Fig 3. The examples of visualizing importance for each molecular structure.

# ナノ炭素材料の物質構造決定とスペクトル評価に関する研究

草部 浩一

兵庫県立大学大学院理学研究科

(世話人：島 伸一郎 准教授)

私達の共同研究グループでは、物質中の原子配置や配列、その結果得られる多体電子系の相転移現象と応答特性を、量子力学に基づく電子論と計算科学の方法を用いて研究している。その中で、ナノ炭素材料と関連する原子層物質を用いた物質合成からデバイス設計に至るシミュレーションによる研究事例、半導体の電子励起に関連する実験との直接比較を目指した理論シミュレーション法の開発事例、について、スーパーコンピュータの利用に関する支援を得ながら実施したものを報告する。

ナノ炭素材料による水素製造・水素貯蔵に関わる触媒能賦活化法を提供してきた。(その他 1) その中で、爆轟ナノグラフェンを与える高速化学反応過程を進化的アルゴリズムにより決定する方法を与えた。(論文 1) このアルゴリズムから発生する分子動力学計算では、反応物質の多様な形態を自動判別する手法が求められる。これを、クラスタリングアルゴリズムによって実施する際に、DBSCAN の有用性を確認した。賦活化ナノグラフェン上では、酸素の攻撃により失活が生じる可能性が高く、実験データと整合するシミュレーション結果が得られている。そこで、賦活化からアルカン脱水素反応に至る反応プロセス設計を行った。その中から、新しいアルカン脱水素方法を見出すことにも成功している。

グラフェン等の原子層物質からは、各種センサー、エレクトロニクスデバイスばかりでなく、量子計算リソースの提供も見込まれる。我々は、グラフェン上の吸着分子(リンカー)の媒質中における力学特性を活用した生体物質センサーを検討して報告した。(論文 2, 学会発表 1) また、新しい原子層デバイスとして、巨大な TMR を生じる物質構造を複数提案し、その理論計算による応答評価を報告した。(論文 3,4, 学会発表 2) 集積化の方法も含めて議論を行っている。

さらに、ナノグラフェン・量子計算リソースとして、2次元量子スピン系を設計して与える方法を提供した。(学会発表 3) 量子計算素子に電子スピンを用いる場合には、デコヒーレンスが大きな課題となる。我々は、電子スピンと電流回転が直接磁氣的に相互作用するという表式を導いた。(学会発表 4) この表式を元にした、デバイス中のデコヒーレンスプロセスを限りなく抑える手法の開発に期待がかかる。

一方、物質の応答特性の理論的評価と、実験との直接比較は、計算科学の価値を高める重要な要素である。我々は、光電子顕微分光法(PEEM)によるスペクトルを理論計算結果と照らし合わせることで解析を行う方法を整備してきている。その例として、半導体超薄膜における電子励起の表現理論、原子層トポロジカル物質の励起スペクトルを再現する計算理論を公開してきた。(学会発表 5,6,7) その成果から、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  における真空劈開面に現れる特異な表面依存性を説明することを試みた。現在、その成果を基にした実験データの直接評価結果を公開する予定になっている。

また、ジルコニアのフォノンスペクトルの精密決定を SCAN-MetaGGA を用いた力場計算を基にして試みた。得られたフォノンスペクトルは実験と良く整合するばかりでなく、未解明であったコヒーレント・テラヘルツ光が、クレメンツ過程により特定された構造転移のみを引き起こすメカニズムの解明にも寄与を与えた。(論文 5, 学会発表 8)

## 論文

1. T. Ishikawa, K. Kusakabe, Y. Makino, S. Sakamoto, N. Okuyama, "Search for the decomposition process of 2,4,6-trinitrotoluene by an evolutionary algorithm", *J. Phys. Chem. A*, **126**, 8082 (2022).
2. Y. Oishi, H. Ogi, S. Hagiwara, M. Otani, and K. Kusakabe, "Theoretical Analysis on the Stability of 1-Pyrenebutanoic Acid Succinimidyl Ester Adsorbed on Graphene", *ACS Omega*, **7**, 35, 31120 (2022).
3. Y. Wicaksono, H. Harfah, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, and K. Kusakabe, "Colossal In-plane Magnetoresistance Ratio of Graphene Sandwiched with Ni Nanostructures", *RSC Adv.*, **12**, 13985 (2022).
4. Y. Wicaksono, H. Harfah, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, K. Kusakabe, "Spin-topological electronic valve in Ni/hBN-Graphene-hBN/Ni Magnetic Junction", *Magnetochem.* **9**, 113 (2023).
5. M. Nagai, Y. Higashitani, M. Ashida, K. Kusakabe, H. Niioka, A. Hattori, H. Tanaka, G. Isoyama, N. Ozaki, "Terahertz-induced martensitic transformation in partially stabilized zirconia", *Commun. Phys.*, **6**, 88 (2023).

## 学会発表

1. 大石 泰弘、荻 博次、萩原 聡、大谷 実、草部 浩一, "グラフェン上に吸着した PASE の理論的構造評価", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 2022 年 9 月 22 日, 22a-A106-6, [口頭].
2. Y. Wicaksono, H. Harfah, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, K. Kusakabe, "Spin-mechatronics device based on controllable mass gapped Dirac cone of graphene in a Ni/hBN-graphene-hBN/Ni magnetic junction", 2023 年第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 2023 年 3 月 15 日, 15a-PA01-35, [口頭].
3. 小松謙慎, 草部浩一, 森下直樹, "局在ゼロモードを有するナノグラフェンの電子状態と水素 NMR", 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023 年 3 月 23 日, 23aD1-3, [口頭].
4. 草部浩一, 北谷基治, 大内涼雅, 柚木清司, 前川禎通, "遅延ベクトルポテンシャルに媒介された電流回転・スピン間結合の理論", 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023 年 3 月 22 日, 22pC2-12, [口頭].
5. 大内 涼雅、草部 浩一、北谷 基治、福本 恵紀、石田 邦夫, "n-GaAs 表面における光励起キャリアの第一原理計算理論", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 2022 年 9 月, 21p-C106-3, [口頭].
6. 草部 浩一、山本 陸人、福本 恵紀、石田 邦夫, "光電子放出量定量評価のための Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 表面計算", 2022 年第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 2022 年 9 月 22 日, 22p-A301-14, [口頭].
7. 東田歩, 草部浩一, 石田邦夫, "単層 MoS<sub>2</sub> の格子モデル励起子理論と励起子 ARPES スペクトルの計算", 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023 年 3 月 22 日, 22pE2-9, [口頭].
8. 永井正也, 東谷悠平, 芦田昌明, 草部浩一, 新岡宏彦, 服部梓, 田中秀和, 磯山悟朗, 尾崎典雅, "テラヘルツ誘起マルテンサイト変態における励起フォノン依存性", 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023 年 3 月 24 日, 24aE2-6, [口頭].

## その他

1. 草部浩一, 「爆轟ススの非酸化的脱水素触媒としての実用化を目指した基礎研究」, 共同研究 阪大基礎工・ダイセル-エンジニアリング・サイエンス共同研究講座 (2022 年 4 月 1 日~2023 年 3 月 31 日)

# 新しいビスマス化合物の機能解明

和達 大樹

兵庫県立大学大学院理学研究科

(世話人：島 伸一郎)

線形のエネルギー運動量分散とそれに対応するディラックコーン状態を持つディラックフェルミオンは、2次元グラフェンやトポロジカル絶縁体の表面などで観測されており、多くの興味を集めている。これらの表面に加え、ディラックフェルミオンとディラックノードは、鉄系超伝導体やビスマス系層状磁性化合物のバルク結晶でも予言されたり、実際に実験で観測されたりしている。本研究では我々は  $\text{LaAgBi}_2$  単結晶におけるディラックフェルミオンの探究を行った。

我々はまず実験的に  $\text{LaAgBi}_2$  の電子状態を観測するために、X線光電子分光測定を行った。励起には実験室光源である  $\text{Al K}\alpha$  線(1486.6 eV)を用いており、単色化により 500 meV 程度のエネルギー分解能が得られている。試料の清浄表面は真空中でのへき開により得た。試料の結晶性は X線のラウエ写真によって確認している。

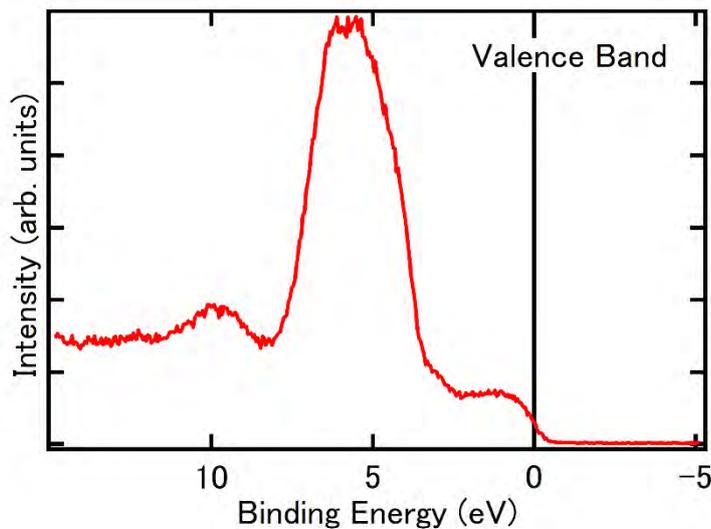


図1： $\text{LaAgBi}_2$ の価電子帯のX線光電子分光スペクトル。

図1に室温で測定した  $\text{LaAgBi}_2$  の価電子帯のX線光電子分光スペクトルを示す。5 eV 付近の Ag のバンドに加え、Bi のバンドがフェルミ準位を横切る様子が明瞭に見られている。角度分解光電子分光によりバンド分散を得る測定に、現在挑戦している。

こうして得られた実験的な電子状態と比較するために、今年度は  $\text{LaAgBi}_2$  の第一原理バンド構造計算に着手した。3月からの開始であったため、スパコンや第一原理計算パッケージ WIEN2k の使い方の習得で終わってしまった。来年度に  $\text{LaAgBi}_2$  に対する実際の計算を行い、特に図1のスペクトルと一致するかどうか、ディラック型のバンド分散が計算で見られるかどうかを検討する。また、BiをSbにかえた類似物質である  $\text{LaAgSb}_2$  についても実験と計算を行い、BiとSbでどのような違いが生まれるかを考察する。同様のスキームで  $\text{LaBi}_2$  などさらに多くの物質の研究まで広げたいと考えている。

# 気象気候ライブラリ SCALE を用いた雄大積雲を対象とした国際モデル間比較 (ICMW) への参画

佐藤 陽祐<sup>A</sup>

北海道大学理学研究院<sup>A</sup>

(世話人：島 伸一郎)

本研究では、次世代気象気候ライブラリ Scalable Computing for Advanced Library and Environment (SCALE, Nishizawa et al. 2015, Sato et al. 2015) に実装された、ビン法雲モデル (SCALE-Bin) を用いて雄大積雲を対象とした国際モデル間比較プロジェクトに昨年度に引き続き参画し、SCALE-Bin を用いて計算された解析を行なった。具体的には、SCALE-Bin の計算結果と、世話人である、島伸一郎が開発を進め、同じ力学コアである SCALE に実装されている超水滴法 (Super Droplet Method: SDM, SCALE-SDM) で同じ実験設定で行なった計算結果とを比較した。超水滴法は粒子法雲モデルであり、ビン法を含めた従来の雲モデルに比べて少ない計算コストで雲微物理特性を詳細に取り扱った計算ができると近年注目されており、従来の雲モデルとの特性の違いを評価することが重要である。

そこで本研究では昨年まで実施してきた SCALE-Bin の結果と SCALE-SDM の結果を比較し、特性の違いを評価した。これらの発表は世話人である島が国内外の研究集会やワークショップにて発表を行った。

## その他

Xue, L., Bera, S., Chen, S., Choudhary, H., Dixit, S., Grabowski, W. W., Jayakumar, S., Krueger, S., Kulkarni, G., Lasher-Trapp, S., Mallinson, H., Prabhakaran, T., & Shima, S. (2022). Progress and Challenges in Modeling Dynamics–Microphysics Interactions: From the Pi Chamber to Monsoon Convection, *Bulletin of the American Meteorological Society*, 103(5), E1413-E1420. <https://doi.org/10.1175/BAMS-D-22-0018.1>

# 水和したリン酸イオン液体の分子シミュレーション

## による水素結合様態の解析

石井 良樹, 高橋 修<sup>A</sup>, 鷲津 仁志

兵庫県立大学大学院情報科学研究科, 広島大学大学院先進理工系科学研究科<sup>A</sup>

(世話人: 鷲津 仁志)

生体適合性の高い電解質溶媒としてイオン液体が注目され, 様々な溶媒設計が進められてきた。そのうちコリン系リン酸イオン液体が優れた水素結合特性を示すことが東京薬科大・藤田講師らによって報告され[1], 水との混和によって得られる水和環境におけるイオン液体の構造形成メカニズムの解明が要請されている。そこで本研究では, 凝縮系の量子化学計算による高精度分子モデリングと分子動力学(MD)シミュレーションを用いて, 水和したコリン系リン酸イオン液体の水和状態を解析した。イオン液体の全原子分子モデルは General Amber Force Field (GAFF) を用いて初期構築した後, 周期境界条件を適用した密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算を用いた自己無撞着モデリング[2]を使って, 凝縮系における平均分子電荷を決定した。図.1 に自己無撞着モデリングで得られた分子電荷の挙動を示しており, 量子計算と MD 計算による構造生成の反復操作によって分子電荷が収束していることがわかる。その反復操作を経て得られた GAFF-DFT モデルを使って得られたスナップショットから, イオン対の隙間に水分子が水素結合ネットワークを形成していることがわかり, 2023 年度はこの MD 計算だけでなく DFT 計算を使って得られる水素結合状態の解析を進めていく。

### 参考文献

[1] N. R. Inbaraj, S. Song, R. Chang, K. Fujita, T. Hayashi, *Langmuir* **39**, 558 (2022).

[2] Y. Ishii, N. Matubayasi, *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 651 (2020).

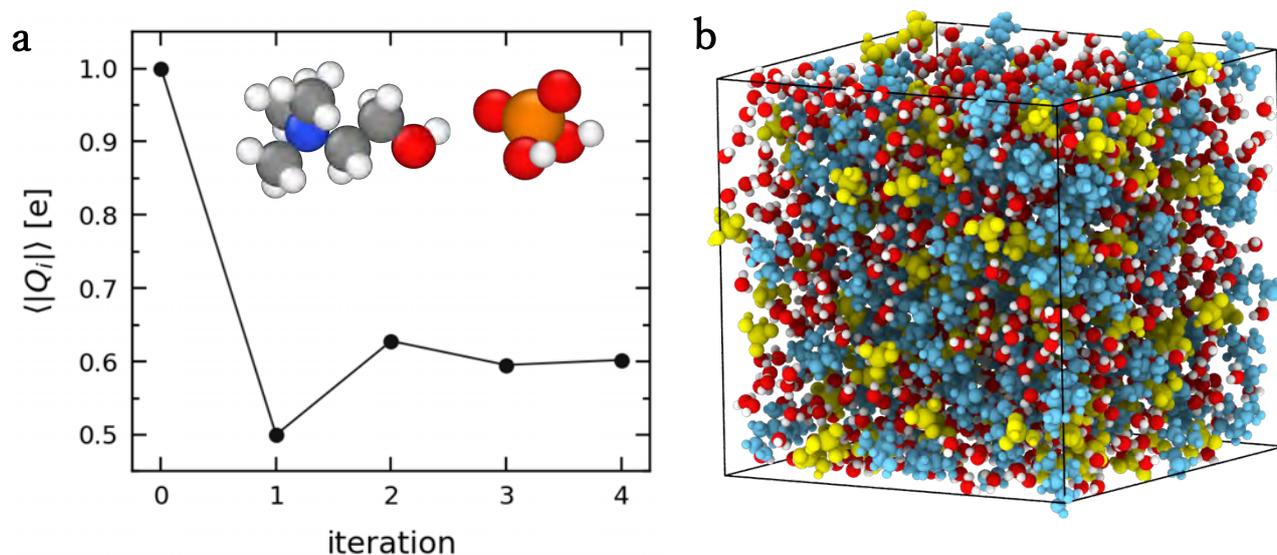


図.1: (a) コリン系リン酸イオン液体の自己無撞着モデリングで得られた平均分子電荷の収束性と, (b) GAFF-DFT モデルの MD 計算で作成した三次元構造のスナップショット。

# データ計算科学連携センターに関する研究

相馬 実波

協同油脂株式会社

(世話人：鷲津仁志教授)

グリースのレオロジー特性の解析を行うにあたり、散逸粒子動力学を用いたシミュレーション方法の習得のため、貴学大学院情報科学研究科データ計算科学専攻の長谷川氏の散逸粒子動力学を用いた逆ミセルのシミュレーションを貴学の計算機にて実施した。

# 超水滴法を用いた浅い積雲の超高解像度実験に関する研究

松嶋 俊樹<sup>A</sup>

神戸大学 惑星科学研究センター<sup>A</sup>

(世話人：島伸一郎)

本研究課題では、世話人の島伸一郎氏らとの共同研究により、超水滴法を用いた浅い雲に関する研究を進めている。

まず、前年度までに開発した数値モデルを用いて、様々な条件設定での評価や検証を行った。超水滴法の初期化では、エアロゾルの分布関数の他に、超水滴の状態のサンプリングに用いる確率分布が必要となるが、これまでの研究で、この確率分布の生成に最適輸送理論を応用する方法を提案した。しかし、計算に用いたアルゴリズムは正規化を含むものであったことで、確率分布のテールにおける精度には問題があった。そのため、テールでの精度を担保できる別のアルゴリズムに切り替えることで、精度を向上させた。孤立的な雄大積雲の数値実験において、開発した初期化方法のパラメータを変えたパラメータスイープを行ったところ、超水滴法を用いた場合に見られていた雲微物理特性の大きな空間変動を抑制する効果が得られることが確認できた。

超水滴密度のゆらぎを抑制するため、超水滴を移流させる際に用いる補間法は、超水滴位置の発散が、格子場の発散と整合的であることが必要である。しかし、これまで用いられてきた補間法は高々一次精度であったことで、格子内の渦による輸送は無視されていた。渦の影響が加味される二次精度の補間法を用いて、粒子の初期位置をマーカーとして追跡したとき、一次精度の補間法を用いた場合に数値的影響によって見られた階段状のパターンが抑制されることを示した。

バルク法とビン法との速度比較をより詳細に行ったところ、超水滴法の相対的な利点は、トレーサー移流の計算量の少なさ、コンパクトさ、浮動小数点数のより低精度な表現が可能という点にあることが分かった。半精度浮動小数点数を用いて、超水滴法によるパーセルモデルの数値実験を行い、数値誤差が粒径分布へどう影響するか調べた。その結果、安直な利用は難しいと結論付けた。



図 1 超水滴法を用いた超高解像度実験で得られた雲の一部

前年度までで開発した数値モデルの設計の詳細に、以上の知見を加えて論文を投稿した。現在査読中だが、プレプリントとしてはすでに公開されている。

## 論文

Matsushima, T., Nishizawa, S., and Shima, S.: Optimization and sophistication of the super-droplet method for ultrahigh resolution cloud simulations, *Geosci. Model Dev. Discuss.* [preprint], <https://doi.org/10.5194/gmd-2023-26>, in review, 2023

## 学会発表

松嶋 俊樹, 西澤 誠也, 島 伸一郎 ”超水滴法による浅い雲の超高解像度実験を可能にする数値モデルの開発”, 気象学会, 北海道大学, 10月26日 (2022年). [口頭]

Toshiki Matsushima, Seiya Nishizawa, Shin-ichiro Shima, Numerical model to enable ultra-high-resolution simulations of shallow clouds using the super-droplet method, AGU fall meeting, Chicago, US (online), 12 December (2022). [oral]

Toshiki Matsushima, Seiya Nishizawa, Shin-ichiro Shima, Numerical model to enable ultra-high-resolution simulations of shallow clouds using the super-droplet method, 103<sup>rd</sup> AMS Annual Meeting, Denver, US (online), 10 January (2023). [oral]

# 側鎖にカルボキシ基を有するポリ置換メチレンと ポリアミンとのコンプレックス化

藤井 遼真, 松本 拓也, 西野 孝  
神戸大学大学院工学研究科応用化学専攻

## 1. 緒言

近年、安定的に合成する手法が確立されたポリ置換メチレンは、主鎖の炭素すべてに側鎖を有する高分子である。ビニル系高分子と比較して、側鎖の密度が大きく、特異な性質の発現が期待されている。これまで、様々な側鎖のポリ置換メチレンを合成し、側鎖密度が熱物性や表面物性に与える影響について取り組んできた。

また、ポリカチオンとポリアニオンを混合すると、高分子鎖が絡み合い、会合複合体が形成される。この複合体は高分子電解質複合体(PEC)と呼ばれ、この特性について元の高分子電解質の構造が影響を与えることが知られている。

本研究では、ポリアニオンとして利用できる、側鎖にカルボキシ基を有するポリ置換メチレンである Poly(acetic acid)(C1-PAA), 参照試料としてポリアクリル酸 Poly(acrylic acid)(C2-PAA)を用いて、MDシミュレーションを行い、ポリ置換メチレンとビニル系高分子の違いについて観察した。また、ポリカチオンとして Linear poly(ethylene imine)(LPEI)を用いて、それぞれとPECを作製した。このPECについても同様にMDシミュレーションを行った。

## 2. 実験方法

重合度1-20のC1-PAAおよびC2-PAA, 重合度10のC1-PAA, C2-PAA, LPEIに対し、Winmostarを用いて量子化学計算を行ったのち、Gromacsを用いて2000分子の水分子中において、MDシミュレーションを行った。また、得られた結果に対して、ERmodを用いて動径分布関数(RDF)および平均水素結合数を計算した。

## 3. 結果および考察

図1には、C1-PAAおよびC2-PAAの側鎖数と水分子との平均水素結合数の関係を示した。C1-PAAはC2-PAAと比較して小さな値を示した。これは、C1-PAAの側鎖が密に存在しているため、水分子との接触面積が小さくなったためであると考えられた。

図2には、重合度10のC1-PAA/LPEIおよびC2-PAA/LPEIのRDFを示した。C2-PAA/LPEIではC2-PAAとLPEIとの間に水が存在しているが、C1-PAA/LPEIではC1-PAAとLPEIとの間に水が存在していないことがわかった。このことから、C1PAA/LPEIでは、C2PAA/LPEIと比較して、C1PAAとLPEIの相互作用が強く、水が入り込みにくくなっていることが確認できた。

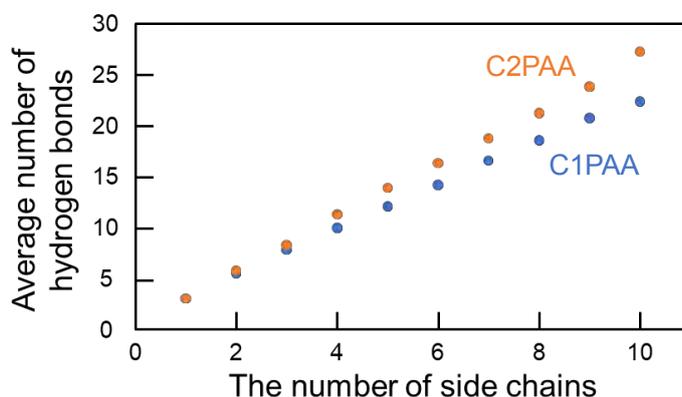


Fig. 1 Plot of the relationship between the number of carboxy groups and the average number of hydrogen bonds.

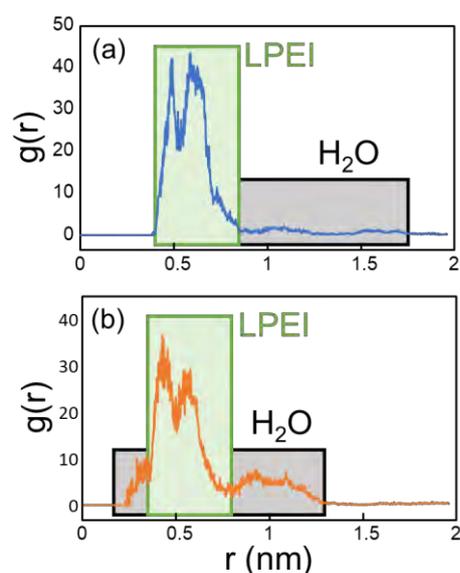


Fig. 2 Radial distribution function of C1PAA/LPEI and C2PAA/LPEI.

# 天然ゴムと臭気成分の相互作用に関する研究

阿知良 浩人<sup>A</sup>

兵庫県立工業技術センター<sup>A</sup>

(世話人：鷺津仁志)

ゴム分子（重合度 15、30 本の鎖）の集団系と 2,6-dimethoxyphenol が 10 分子の集団の間に界面を作成し、600 K の NVT アンサンブルシミュレーション（700 ps）で安定化してから NPT アンサンブルシミュレーション（700 ps）で溶融状態にし、313 K までアニーリング処理をした時の構造を左図 1 に示す。溶融状態およびアニーリング後の状態に関係なく、2 成分は相分離していることがわかった。ゴム分子をレファレンスとして 2,6-dimethoxyphenol の動径分布関数を計算した。（右図 1）0.2 nm 以上からブロードした曲線が得られた。図 2 の同成分の結果と比較すると、鋭いピークが観測されていないことから、ゴム分子と 2,6-dimethoxyphenol の間の相互作用は弱いことが示唆された。

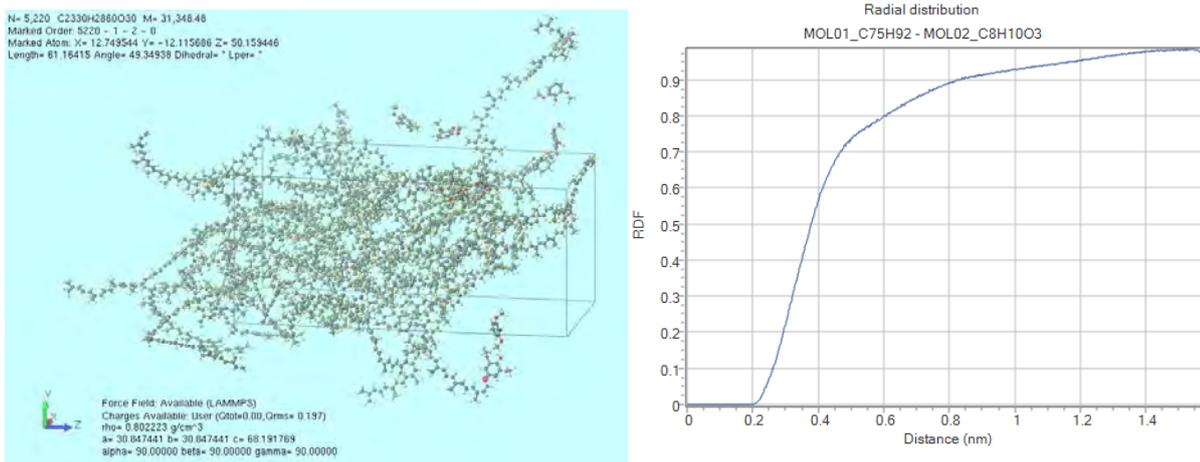


図 1 ゴム分子と 2,6-dimethoxyphenol の 2 成分系のアニーリング後の構造（左）および 2 成分系の動径分布関数（右図）

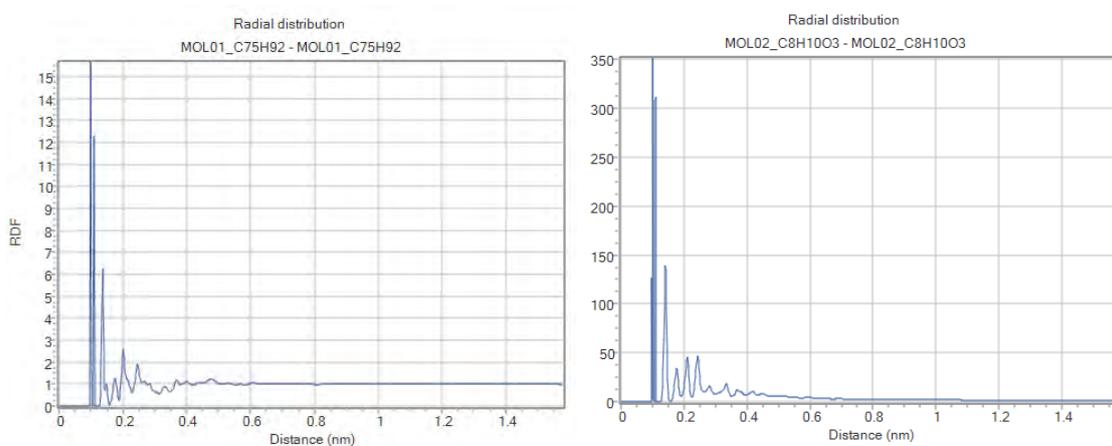


図 2 ゴム分子同士（左）および 2,6-dimethoxyphenol 同士（右）の動径分布関数

## 学会発表

阿知良 浩人, "天然ゴム (RSS) と臭気成分の溶解度パラメータおよび分子動力学シミュレーション", 2023 年日本コンピュータ化学会春季年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2023 年 6 月 2 日予定. [口頭発表]

## 第2回アカデミアインターンシップ～可動性架橋の形成におけるシミュレーション解析～

以倉峻平<sup>A</sup>

大阪大学大学院理学研究科<sup>A</sup>

(世話人：鷲津 仁志、石井 良樹、田尾 綾香)

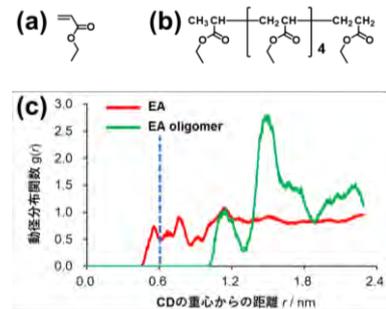
**<緒言>** 当研究グループは、適切なサイズの主鎖モノマーとシクロデキストリン (CD) モノマーの無溶媒共重合により、主鎖が CD 環を貫通した可動性架橋を形成することを見出した<sup>1,2</sup>。また、CD 修飾直鎖高分子存在下で別種の主鎖モノマーの無溶媒重合により、可動性架橋で異種主鎖ポリマー間をつないだ高分子材料を作製した<sup>3</sup>。本研究では可動性架橋の形成メカニズムを調査するため、分子動力学シミュレーション (MD) 解析を行った。

**<結果・考察>無溶媒重合過程の包接挙動の解析** アクリルアミド重合基修飾アセチル化  $\gamma$ CD (PACyCD) が中心に 1 個配置したセルに主鎖モノマーのポリエチレンアクリレート (EA) および生長鎖としての EA 6 量体オリゴマーを配置して MD 解析を行った (Fig. 1)。PACyCD の重心からの距離  $r$  に対する動径分布関数を算出し、空孔サイズにあたる  $r = 0.6\text{nm}$  の中を「包接」と扱う。EA600 個導入したモデルでは EA の PACyCD への包接が観測された。一方、EA 5 量体オリゴマー 120 個導入したモデルでは全く包接されなかった (動画ではアセチル基を自己包接するのみで、オリゴマーは全く包接せず)。EA300 個と EA 6 量体オリゴマー 60 個を混合した系でも同等の傾向が見られた。この結果より、生長中のポリマーを後から PACyCD 環が認識して包接する可能性は低く、先に包接された EA が重合することで可動性架橋を形成した可能性が高いことが示唆された。

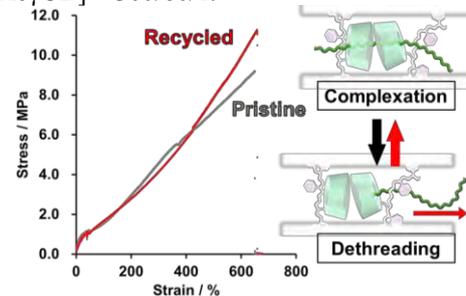
**無溶媒重合過程の包接挙動の解析** PACyCD 修飾ポリスチレンの環を EA 鎖が貫通した可動性架橋異種高分子複合材料は THF に溶解可能であり、溶媒留去によるフィルム化によって元の力学物性をほぼ取り戻した (Fig. 2)。NOESY-NMR 測定結果から溶解時に脱離した EA 鎖が溶媒留去時に再び包接されることを確認した。まずは溶解挙動を確認するため、溶媒 THF300 個と EA 6 量体オリゴマー 50 個導入したモデルで解析したところ、THF が非常に包接されやすいことが明らかになった (Fig. 3a)。再包接挙動の確認を試みるにあたり、EA 6 量体オリゴマー単体では前述の通り包接されないため、少量の THF がオリゴマーの包接を助ける可能性を考えた解析を行った。そこで THF80 個と EA 5 量体オリゴマー 112 個導入したモデルで解析した結果、EA オリゴマーも THF も全く包接されなかった (Fig. 3b)。この結果ではオリゴマーの再包接を再現することはかなわなかったものの、乾燥過程で THF の包接が解離することは示唆された。今回は PACyCD が 1 分子での解析であったが、PACyCD が数個レベルで凝集しやすい傾向が知られている<sup>4</sup>ことから、複数個の PACyCD の協働効果が働けばオリゴマーの包接を再現できた異なる傾向を示した可能性がある。

### <参考文献>

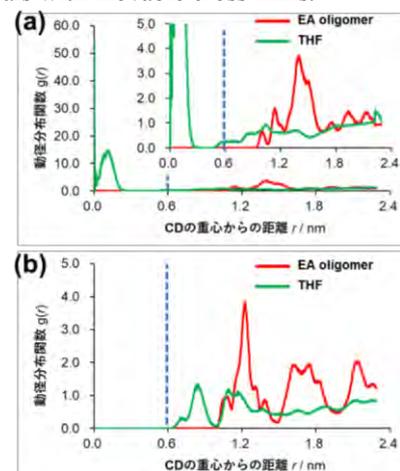
[1] R. Ikura, Y. Takashima, et. al., *Macromolecules* **2019**, *52*, 6953-6962. [2] R. Ikura, Y. Ikemoto, Y. Takashima, et. al., *Polymer* **2020**, *196*, 122465. [3] R. Ikura, Y. Ikemoto, G. Matsuba, Y. Takashima, et. al., *Mol. Syst. Des. Eng.* **2022**, *7*, 733-745. [4] Y. Kawai, R. Ikura, Y. Ishii, H. Washizu, G. Matsuba, Y. Takashima, et. al., *Mol. Syst. Des. Eng.* **2022**, *7*, 733-745.



**Fig. 1.** Chemical structures of (a) EA and (b) EA oligomer. (c) Radial distribution function obtained by the MD calculations of [EA]/[EA oligomer]/[PACyCD] = 300/60/1.



**Fig. 2.** Stress-strain curves of pristine and recycled samples of the dissimilar polymers knitted materials with movable cross-links.



**Fig. 3.** Radial distribution function obtained by the MD calculations of [EA oligomer]/[THF]/[PACyCD] = (a) 300/50/1 and (b) 112/80/1.

気象・生体分子系・結合振動系など

## 時空間階層性のある現象に関する研究

戸田 幹人<sup>ABC</sup>

奈良女子大学理学部<sup>A</sup>, 兵庫県立大学情報科学研究科<sup>B</sup>

北海道大学電子科学研究所<sup>C</sup>

(世話人：) 島 伸一郎

気象・生体分子などの動力学は、時間空間に階層性のある現象である。このような現象の解析には、数値計算・理論の両面において、階層性に焦点を当てた手法が必要になる。本年は、気象に関しては、共同研究者である島伸一郎氏を中心として開発されてきた超水滴法を対象に、階層的解析手法の開発を行ってきた。また生体分子など、時空間階層性・拘束系の動力学に関しても、数値計算・理論の両面の研究を行ってきた。

論文

Yoshiyuki Y. Yamaguchi, Tatsuo Yanagita, Tetsuro Konishi, and Mikito Toda

”Dynamically induced conformation depending on excited normal modes of fast oscillation”

Phys. Rev. E 105, 064201(14 pages) (2022)