

先端研究拠点事業—国際戦略型—
「ソフトマターと情報に関する非平衡ダイナミクス」

共同研究プログラム 派遣報告書

2014年10月23日

氏名(ふりがな)	村島隆浩 (むらしまたかひろ)
所属機関・部局・専攻内の所属分野	東北大学大学院理学研究科物理学専攻
職名	助教
メールアドレス	murasima@cmpt.phys.tohoku.ac.jp
電話番号、FAX	022-795-5718

派遣先

受け入れ研究者氏名	Friederike Schmid
所属機関(国)	Johannes Gutenberg University, Germany
身分	Professor
メールアドレス	Friederike.schmid@uni-mainz.de
研究室 URL	http://www.komet331.physik.uni-mainz.de/schmid.php
電話番号、FAX	+49-6131-39-20365(20496)

共同研究

研究課題名	和文	紐状ミセル溶液のマルチスケールシミュレーション
	英文	Multiscale simulation of wormlike micellar solution
派遣期間	2014/10/04-2014/10/09	

実際に行った研究活動、成果などを1-2ページ程度で記述してください。

紐状ミセル溶液は、界面活性剤分子から成る紐状ミセルが複雑に絡み合いネットワークを形成した溶液である。溶液としての性質は高分子溶液と似ているが、大きなせん断変形が加えられると紐状ミセルはちぎれるという特徴から高分子溶液とは異なる流動挙動を示す。我々は過去にマルチスケールシミュレーション法を用いて高分子溶液の流動挙動を調べた。今回同様の方法を紐状ミセル溶液に適用し、紐状ミセル溶液の流動挙動の解析を行った。本研究結果に関連した、界面活性剤分子系の分子シミュレーション研究を行っている Schmid 教授らと議論を行うことにより意見交換を行うこと、また同 Schmid 教授が主宰するマルチスケールシミュレーションのワークショップに参加し研究発表を行い、ドイツに限らずヨーロッパ各地から集まった、マルチスケールシミュレーション法の研究者らと交流し、議論を深めることを目的としてドイツ(マインツ市)に赴いた。

Schmid 教授らのグループでは界面活性剤が作る膜の連続体モデルを自己無撞着理論(SCF)で求め、周りの流体場を格子ボルツマン法で求めるハイブリッドモデルの研究を行っていた。私の使っている紐状ミセルのモデルは膜の形状を限定し粗視化したものを用いているため、今後、膜の変形を取り入れたモデルを考慮する時の参考になった。また分子間の相互作用を場で扱う、MD 手法と連続場手法のハイブリッド手法の研究も行っていた。Milano と川勝による方法では分子間の相互作用は場で取り扱うが、このグループのハイブリッド法は、ある分子の近くでは分子間相互作用を直接扱い(例えば2点間のLJ相互作用)、遠方になると場として扱う(フローリー・ハギンズ相互作用)手法であった。どの距離から粒子として扱うか連続場として扱うか、任意の解像度を設定できるため、計算効率の面で利点があるが並列化効率を上げるのは Milano らの方法に比べるとやや難しいと感じた。しかしながら従来のMD手法に比べると効率よく計算が行える手法であるため、問題に応じては使える場面があると感じた。私の行っているマルチスケールシミュレーション手法ではミクロスケールの計算

の効率化が課題であり、信頼性のある新しい粗視化モデルは参考になった。



図 1 . Schloss Waldthausen, Mainz, Germany.

10月6日～8日にはマインツ滞在期間中に開催された“Multiscale simulation methods for soft matter systems”に参加した。同時期にカリフォルニアバークレーでマルチスケールシミュレーションの国際会議“Multiscale Material Modeling 2014”が開催されていたため、私の知人の多くはそちらに参加していたようだ。会場はSchloss Waldthausen（図1）というマインツ市郊外にある築100年の比較的新しいお城であった。マインツ駅からバスで片道20分の距離にあり、周辺は林に囲まれた静かな場所で、研究会に専念することができた（お城ではポスター発表のみあり、口頭発表はお城の隣の建物であった）。

マルチスケールシミュレーションで現在の主流は、MDシミュレーションをいかに高速化させるかということに主眼を置きたいいわゆる粗視化手法、さらにMDと粗視化手法のハイブリッド手法の開発である。私の研究のマルチスケールシミュレーションはミクロスケールの分子シミュレーションとマクロスケールの流体シミュレーションを接続するシミュレーションで、ミクロスケールの分子シミュレーションの高速化に関わる粗視化手法の開発は、私の研究においても重要である。本会議では様々な粗視化手法について議論が行われた。上にも述べたが、粒子法と場を接続して計算コストを下げする方法にも様々なやり方があり、私の研究においても参考になる部分があった。日本の会議ではなかなかお目にかかれない、論文等で名前をお見かけする方々の発表はとても刺激になった。私の行っているMicro-macro型のマルチスケールシミュレーションに関する発表は2件あり、熱伝導に関するマルチスケール手法に関しては私の方法でも取り扱える点で今後の参考になった。また研究会開催期間中に、ドイツ・イタリア・日本の研究者との共同研究の打ち合わせに加えていただく機会があり、私もそのプロジェクトに加えていただくこととなった。

会議の最後に、ドイツにおいてソフトマターのマルチスケールシミュレーションに関する新しい研究プロジェクトが発足したことの報告があった（ホームページは<http://trr146.de>）。ソフトマターのシミュレーションに特化したプロジェクトで、ソフトマター分野のシミュレーションを専門に活躍されている方は国際会議等の情報は参考になるかもしれない。またポスドクの公募も現在多数出ている（<http://trr146.de/en/openings>）ため、就職活動中の方は必見である。来年6月に再びマインツで会議が開催される予定なので、本派遣プログラムを利用して参加したいと考えているところである。

最後に、昨年引き続き私のドイツへの渡航を許可いただいた佐々真一教授と、事務手続きでお世話になった秘書の中西陽子様へ感謝いたします。