

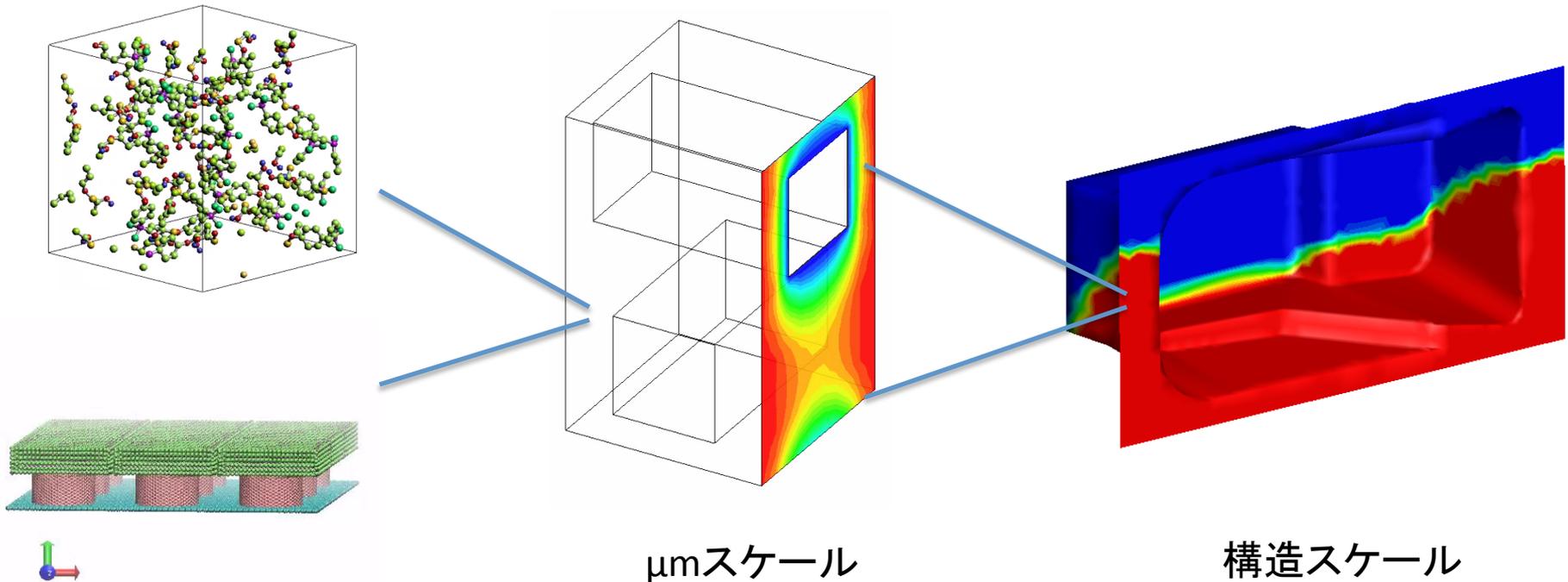
分子シミュレーション研究会の活動報告 (2014年4月～2019年3月)

東京理科大学 松崎亮介

研究会の趣旨

- 背景

- 計算機性能の発展に伴い, 複合材料の特性や物性を原子/分子レベルから予測することが可能になりつつある.



原子・分子スケール

古典的分子動力学法
散逸粒子動力学
量子力学

μm スケール

構造スケール

有限要素法

均質化法

研究会の趣旨

● 背景

- 計算機性能の発展に伴い、複合材料の特性や物性を原子/分子レベルから予測することが可能になりつつある。

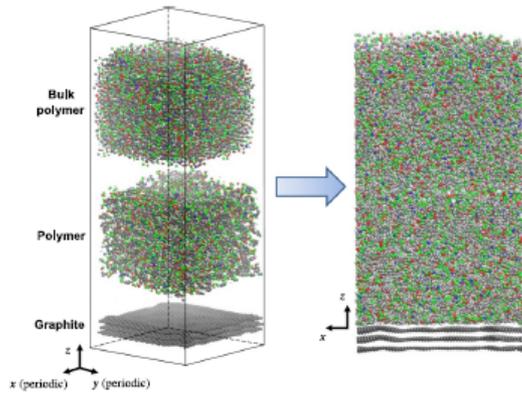


Fig. 3. Combining three separate MD models (left) to form the complete MD model of the composite interface (right).

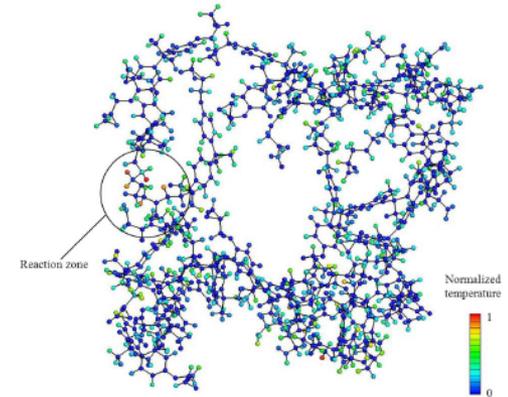
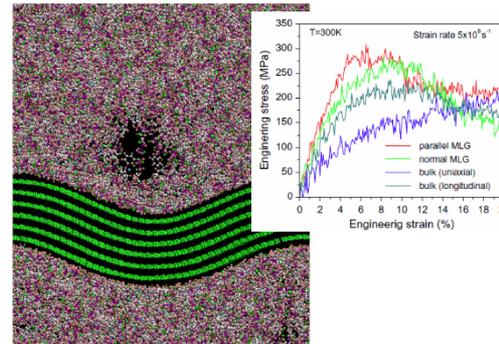
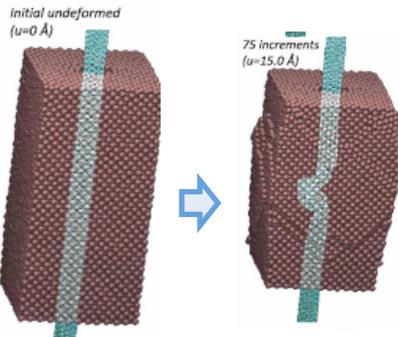


Fig. 9. Temperature distribution of reaction process

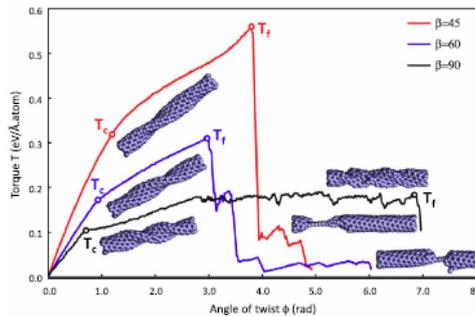
グラフェン/エポキシ界面
C.M. Hadden, *CST*, 2013
(Funded by NASA & AFOSR)

グラフェン/エポキシ界面
C. Li, *Compos. A*, 2012
(Funded by Boeing)

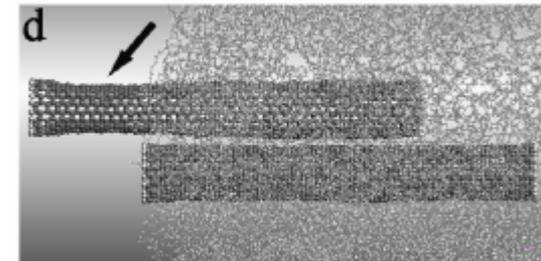
Epoxy架橋反応
T. Okabe, *Polymer*, 2013



CNT複合材圧縮挙動
N. Silvestre, *CST*, 2014



カイラルCNTのねじり引張挙動
B. Faria, *CST*, 2013



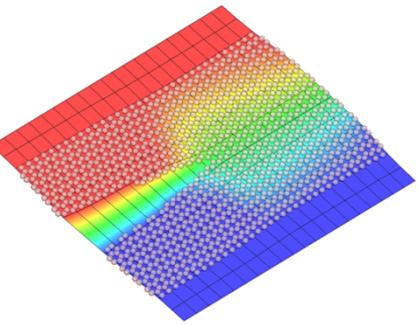
CNT/ポリエチレンのpull out
J. Zhang, *Compos. A*, 2013

研究会の趣旨

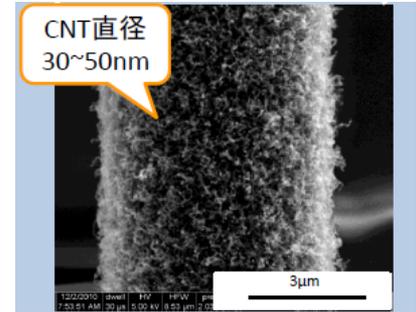
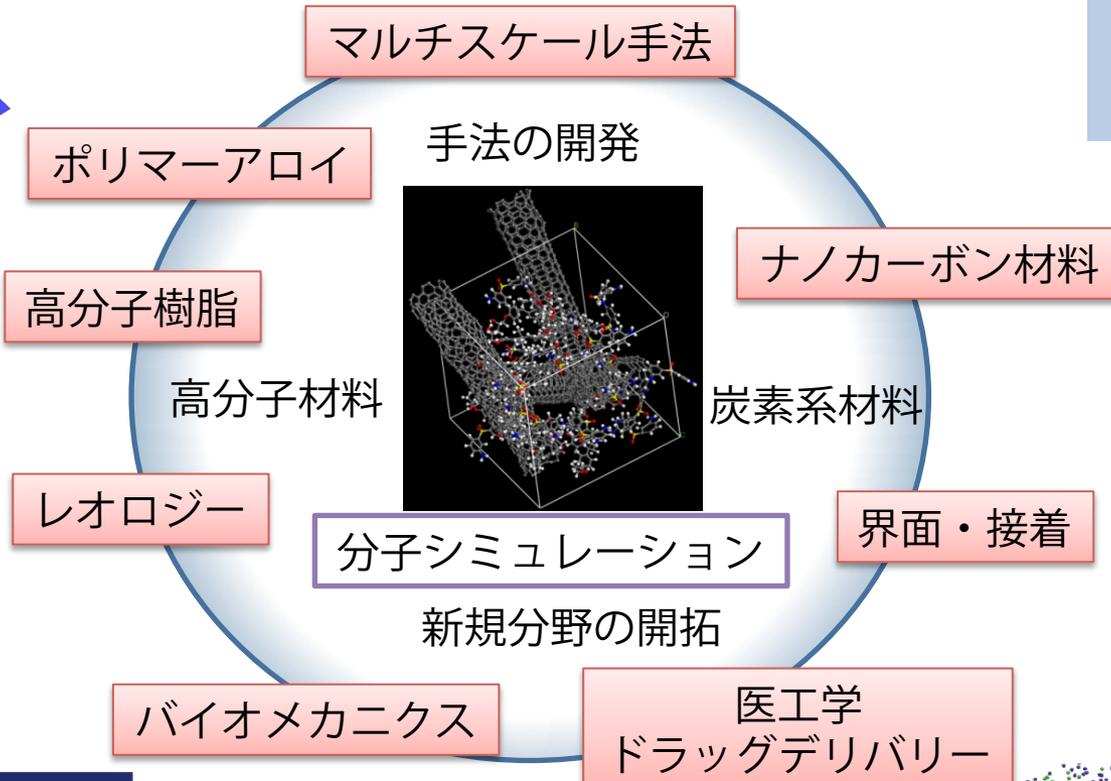
- 趣旨

- 分子シミュレーションは、材料開発、実験的研究に**原子・分子の視点から解釈を与える**ことのできる有用なツール
- 従来の構造材料としての複合材料にとどまらず、**化学・バイオ・医学分野まで含めた複合材料の物性**について、原子や分子レベルのミクロな構造や挙動から分子シミュレーションにより明らかにする。
- 若手研究者で次世代複合材料研究の核を作る。

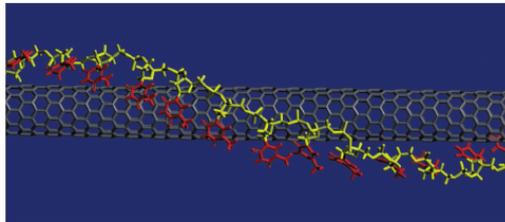
取り扱う研究テーマ



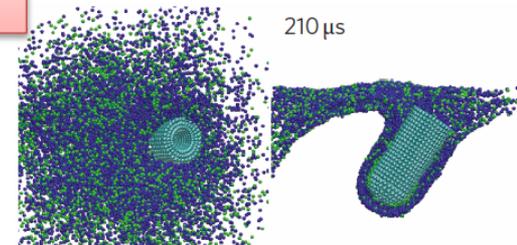
Coupled atomistic/
continuum simulation
(J. Oswald, 2012)



CNTグラフト炭素繊維



DNA/SWNT複合体による可溶化
(*Nature Materials*, 2003)



MWCNTの細胞への侵入
(*Nature Nanotechnology*, 2011)

研究会構成員

- 大学関係者 17名

- 東京理科大学 松崎亮介(代表), 東京理科大学 小柳潤(庶務幹事), 金沢工業大学 田中基嗣(会計幹事), 東北大学 岡部朋永(WEB会議担当), 静岡大学 矢代茂樹(HP担当), 東京理科大学 向後保雄(監査), 東京理科大学 荻原慎二, 金沢工業大学 齊藤博嗣, 愛媛大学 黄木景二, 山口大学 野田淳二, JAXA 吉村彰記, 東京理科大学 遠藤洋史, 芝浦工業大学 坂上賢一, 千葉大学 魯云, 首都大学東京 小林訓史, 埼玉大学 坂井建宣, 青山学院大学 有川秀一, 東京工業大学 高橋航圭

- 公的研究機関 3名

- JAXA 武田真一, JAXA 文淑英, JAXA 平野義鎮

- 企業 4名

- IHI 船渡川治, トヨタ自動車 諸星圭, JSOL 小沢拓, ダッソー・システムズ 山本智

(敬称略)

定例研究会開催について

- 年4回の研究会を開催し、分子シミュレーションに関して、成果発表、勉強会、他分野専門家による講演を行う。
- 2014年5月 **第1回 分子シミュレーション講義**
 - 理科大@葛飾+テレビ会議
- 2014年9月 **第2回 報告会**
 - 理科大@葛飾+テレビ会議
- 2014年12月 **第3回 分子シミュレーション講義**
 - 東北大学+テレビ会議
- 2015年3月 **第4回 報告会**
 - 理科大@葛飾(JCCM)

研究会準備会

2014年1月9日(木)9:30-11:30 WebEx会議

- 松崎 亮介(東理大)
「分子シミュレーション研究会の目的と運営方針について」
- 小柳 潤先生(東理大)
「LBL法によるグラフェン複合材料の創製」
- 田中 基嗣先生(金沢工大)
「加水分解制御機能を付与した生分解性樹脂における最適分子設計」
- 松崎 亮介(東理大)
「MDシミュレーションソフトLAMMPSの紹介」

第1回 分子シミュレーション研究会(発足会)

日時: 2014年5月30日, 31日

場所: 東京理科大学葛飾キャンパス

5月30日(金) 発足会

- LAMMPS(古典的分子動力学計算)実習 (松崎, 小柳先生)
- 分子シミュレーションについて (東北大学 岡部先生)
- 高分子材料シミュレーション ~Materials Studioの事例~ (アクセルリス山本様)

5月31日(土)

- MOPAC(半経験的分子軌道計算)実習 (松崎, 小柳先生)
- J-OCTAのご紹介(JSOL 小沢様)

第1回 分子シミュレーション研究会(発足会)



第2回 報告相談会

日時：2014年9月27日(土)13:30-

場所：東京理科大学葛飾キャンパス

- 東京工業大学 高橋航圭先生
「薄膜粘着剤の強度評価」
- 東京理科大学 小柳潤先生
文献紹介「J.P. Foreman et al., Multi-scale modelling of the effect of a viscoelastic matrix on the strength of a carbon fibre composite」

研究紹介

「C/C複合材料の繊維/マトリクス界面に関する分子シミュレーション」

「液晶分子のブルーフェイズ発現に関する分子シミュレーション」

- 東京理科大学 松崎亮介
「分子シミュレーションを利用した異材界面評価に関する文献紹介」

第3回 分子シミュレーション講義

日時：2014年12月19日(金)13:30-

場所：東北大学 青葉山東キャンパス

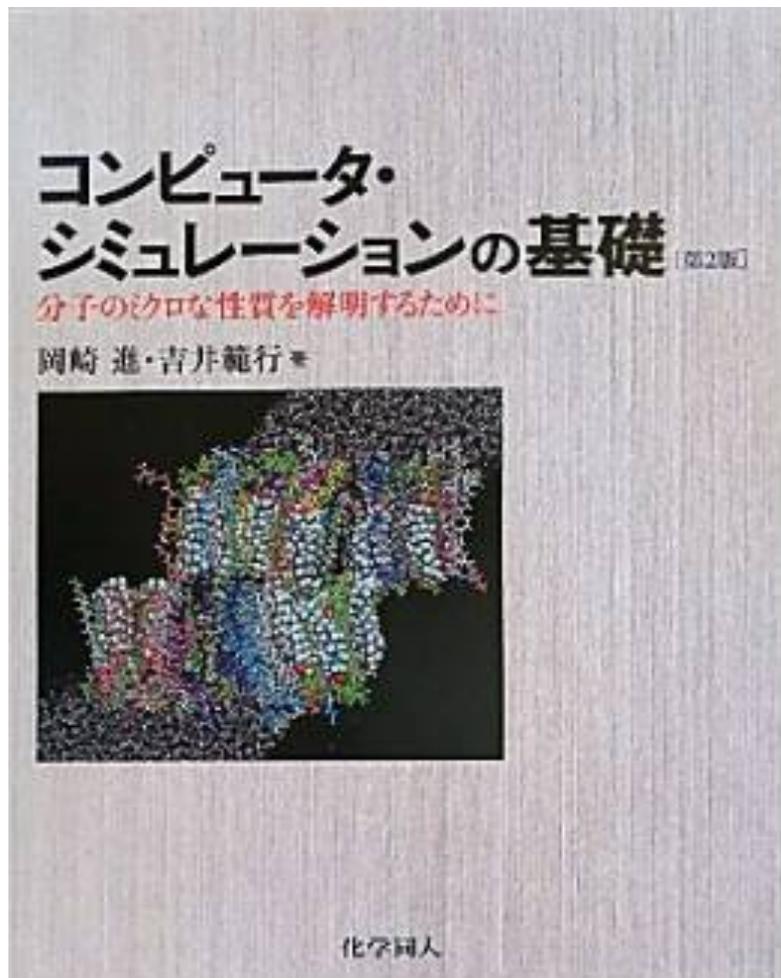
講演内容：

- 菊川豪太先生(東北大学 流体科学研究所ナノ流動研究部門)
「有機分子鎖の作る分子スケール構造と熱伝導特性」
- 諸星圭様(トヨタ自動車株式会社 FP部)
「高分子材料開発における分子シミュレーションと実験との比較」
- 大矢豊大様(東北大学理学研究科物理学専攻)
「自己無撞着場理論を用いた高分子溶液の記述」

第3回 分子シミュレーション講義



輪読勉強会



コンピュータ・シミュレーションの基礎, 岡崎進・吉井範行, 化学同人.

- WebEXを用いたパワーポイント講義形式
- 講師は交代制



輪読勉強会

7月7日 18:00-

第1回 2章 運動方程式の一般的な表し方: 並進運動を記述するための基礎(松崎)

8月27日 18:00-

第2回 3章 複雑な分子運動を表す運動方程式: 回転運動を記述するための基礎(小柳先生)

9月22日 18:00-

第3回 4章 分子間力に働く力: 分子間相互作用の求め方(田中先生)

10月20日 18:00-

第4回 5章 運動方程式の数値計算法: 数値的に解くための基礎(矢代先生)

11月19日 18:00-

第5回 6章 長距離力の取り扱い方(I) エワルドの方法と相互作用計算の高速化(齊藤先生)

1月20日 18:00-

第6回 8章 アンサンブルの発生: 温度と圧力を制御する方法(野田先生)

第7回 10章 MD計算から求められる物理量(I) 静的な性質を求めるための基礎(吉村様)

第8回 11章 MD計算から求められる物理量(II) 動的な性質を求めるための基礎(高橋先生¹⁵)

定例研究会以外の活動

- 2年目の秋から複合材料シンポジウムとJCCMでMDのOSを立ちあげる(計8回)
 - 本会議からスタート
- 日本複合材料学会等(強プラ協会も予定)で, MDの特集号の発行する.
 - 松崎亮介, 小柳潤, 岡部朋永, 山本智, 小沢拓, 分子シミュレーション研究会, 日本複合材料学会誌, (2014), pp.238-243.
 - 日本複合材料学会誌でMD特集号を予定
- 関連するプロジェクトに研究会として加わり, 共同研究を行う場とする.
- 複合材料とMDに関するレビューを共同執筆

情報発信と連絡方法

- 研究会HP : <http://www.rs.tus.ac.jp/md/>
 - 研究会開催告知や講演資料をアップ
 - 参考図書を紹介
 - 研究会メンバーの関連論文の紹介
- 複合材料学会メーリングリスト
 - 開催告知, 関連論文紹介等
- 事務局(秘書)
 - 理科大松崎研内に設置
 - 石原 真紀子 (md@rs.tus.ac.jp, mishihara@rs.tus.ac.jp)



入会をご希望の方は事務局までご連絡下さい。