

「分子シミュレーション学会学術賞を受賞」

物質設計評価施設 樋口 祐次

この度、2021年度分子シミュレーション学会学術賞を受賞いたしました。授与式は11月30日に岡山大学で開催された分子シミュレーション討論会にて行われました。これまでにご指導いただきました野口博司先生、吉川研一先生、久保百司先生、加藤隆史先生には感謝の念に堪えません。共同研究者の皆様にもこの場をお借りして深く感謝申し上げます。

関連論文[1-5]をはじめとした「ソフトマター材料に関する分子シミュレーション」に関する研究が評価され、今回の受賞となりました。これまでに分子シミュレーションを用いて高分子、ゲル、両親媒性分子などのソフトマター材料の構造と物性を明らかにしてきました。ソフトマターは分子が集まって初めてその構造や機能を発現することから、分子レベルからメゾスケールまで幅広く理解する必要があります。さらに、系を決定する構成要素が多く存在することから、現象を本質的に理解するには、どのスケールでどの要素が重要か明確にする必要があります。この問題に対して、量子化学計算・全原子計算・粗視化計算を用いたマルチスケールのモデリングやシミュレーションと、自身でプログラム開発を行った大規模計算を用いることで、理論モデルが材料などの構造や物性を再現する要因に迫ってきました。構造作成すら困難なソフトマター実材料を適切にモデリングし、実験結果を再現するとともに、実験では解明が困難な分子論的理解を確立してきました。ソフトマターの実材料の理論的な理解という学理構築の観点や工学・実学への波及など、分子シミュレーション分野の発展に貢献できたと思います。

高分子材料の破壊プロセスに関しては、物性研究所のスーパーコンピュータを使用した大規模計算を実施することで、小規模な計算では扱えなかった構造、物性、現象を明らかにしました。物性研スパコンを使用することで、インパクトのある結果を出すことができました。この結果に関して物性研スパコンのパフレットにも取り上げていただきました[6]。ハードとソフトの発達に伴い計算規模も大きくなってきており、分子シミュレーションでできることも増えていくかと思っています。今後も分子シミュレーションによる大規模計算を行い、物性分野に貢献できればと思

います。研究の詳細な内容や、私の研究歴などに関しては分子シミュレーション学会誌にも寄稿しましたので[7]、ぜひ一度ご覧いただければと思います。2023年の1月末にウェブ上で無料公開される予定です。

関連文献

- [1] Y. Higuchi and M. Kubo, “Deformation and Fracture Processes of a Lamellar Structure in Polyethylene at the Molecular Level by a Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation”, *Macromolecules* **50**, 3690–3702 (2017).
- [2] Y. Higuchi, “Coarse-grained molecular dynamics simulations of void generation and growth processes in the fracture of the lamellar structure of polyethylene”, *Phys. Rev. E* **103**, 042502 (2021).
- [3] Y. Higuchi, K. Saito, T. Sakai, J. P. Gong, and M. Kubo, “Fracture Process of Double-Network Gels by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation”, *Macromolecules* **51**, 3075–3087 (2018).
- [4] H. Ito, Y. Higuchi, and N. Shimokawa, “Coarse-grained molecular dynamics simulation of charged lipid membranes: Phase separation and morphological dynamics”, *Phys. Rev. E* **94**, 042611 (2016).
- [5] Y. Higuchi, Y. Asano, T. Kuwahara, and M. Hishida, “Rotational Dynamics of Water at the Phospholipid Bilayer Depending on the Head Groups Studied by Molecular Dynamics Simulations”, *Langmuir* **37**, 5329–5338 (2021).
- [6] 樋口祐次, “分子シミュレーションで迫る高分子材料の破壊プロセス”, 東京大学物性研究所スーパーコンピュータパンフレット, 15-16, (2021).
- [7] 樋口祐次, “学術賞受賞寄稿「ソフトマター材料に関する分子シミュレーション」”, 分子シミュレーション学会誌「アンサンブル」 **24**, 2-5 (2022).