

令和元年6月25日現在

機関番号：14303

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05244

研究課題名(和文)大規模分子シミュレーションによる有機ナノチューブ・ナノベシクル形成機構の解明

研究課題名(英文)Clarification of the mechanisms of organic nanotubes and nanovesicles by large-scale molecular simulation

研究代表者

藤原 進 (FUJIWARA, SUSUMU)

京都工芸繊維大学・材料化学系・教授

研究者番号：30280598

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：双頭型両親媒性分子の自己会合機構を解明するため、粗視化モデルに対する散逸粒子動力学シミュレーションと分子動力学シミュレーションを併用し、自己会合体の構造及び形成過程を調べた。その結果、粒子間相互作用の強さを変えることにより、ベシクルやチューブ、ひも状ミセルなど、様々な形態の自己会合構造を形成することが分かった。また、両側の親水基が異なる非対称双頭型両親媒性分子に比べて、両側の親水基が同じ対称双頭型両親媒性分子の方が、多様な自己会合構造を形成することも明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で得られた、非対称双頭型両親媒性分子に比べて対称双頭型両親媒性分子の方が多様な自己会合構造を形成するという成果は、分子の対称性が自己会合構造の多様性に影響を及ぼすことを示している。この知見は、系全体の自己組織化において微視的性質が重要な役割を果たすことを示唆するものであり、自己組織化研究における学術的意義は大きい。

研究成果の概要(英文)：In order to elucidate the self-assembly mechanism of bolaamphiphilic molecules, dissipative particle dynamics simulation and molecular dynamics simulation for the coarse-grained model are used in combination to investigate the self-assembled structures and their formation processes. By changing the strength of the interparticle interactions, it is found that various forms of self-assembled structures such as vesicles, tubes, and wormlike micelles are formed. In addition, it is also revealed that symmetric bolaamphiphilic molecules having the same hydrophilic group on both sides form a variety of self-assembled structures than asymmetric bolaamphiphilic molecules having different hydrophilic groups on both sides.

研究分野：ソフトマターの物理・計算物理

キーワード：双頭型両親媒性分子 自己会合 ナノベシクル ナノチューブ 分子シミュレーション 散逸粒子動力学法 粗視化分子動力学法

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

一般に、脂質分子や界面活性剤分子などの両親媒性分子は、水になじむ親水基を頭部に、油になじむ疎水基を尾部に持つ分子である。このような単頭型両親媒性分子を水に溶かすと、疎水性相互作用により、溶媒中に等方ミセル相やヘキサゴナル相、ラメラ相などの凝集構造を自発的に形成する。また、低濃度領域では、ベシクルなどの中空膜構造も形成される。

これまで、単頭型両親媒性分子の構造形成に関しては、国内外を問わず、数多くの実験的研究ならびに理論・シミュレーション研究がなされてきた。そのため、単頭型両親媒性分子系については、構造形成に関する様々な知見が蓄積されてきた。また、有機ナノチューブ・ナノベシクルに関しても、ナノ構造の超高密度化などの工業的要請により実験的研究が精力的に行われている。しかしながら、思い通りのサイズや形状を持った有機ナノチューブ・ナノベシクルの形成機構を明らかにすることは、実験でもシミュレーションでも、今なお困難である。

有機ナノチューブ・ナノベシクルのサイズや形状を制御するための方法論を確立することを目指して、本研究では双頭型両親媒性分子を対象とし、2種類の分子シミュレーション(散逸粒子動力学(DPD)シミュレーション及び分子動力学(MD)シミュレーション)手法を効果的に組み合わせることにより、有機ナノチューブ・ナノベシクル形成の機構を解明する。

2. 研究の目的

有機ナノチューブ・ナノベシクルなどのソフトナノ材料は、シリコンナノデバイスなどのハードナノ材料にはない「やわらかい」という特質を有しているため、ナノテクノロジーのみならずバイオテクノロジー分野においても様々な応用の可能性を秘めている。例えば、脂質分子から成る有機ナノチューブは、ナノワイヤーやドラッグ・デリバリー・システムなどへの応用展開が期待されている。このような社会的要請を背景に、本研究では、有機ナノチューブ・ナノベシクルのサイズや形状を制御するための方法論を確立することにより社会的貢献を果たす。具体的には、2種類の分子シミュレーション手法を効果的に組み合わせることにより、有機ナノチューブ・ナノベシクル形成機構の解明を効率的に行うことを本研究の目的とする。

3. 研究の方法

双頭型両親媒性分子の自己会合機構を効率的に解明するため、粗視化モデルに対するDPDシミュレーションとMDシミュレーションを併用し、自己会合体の構造及び形成過程を調べる。双頭型両親媒性分子の粗視化モデルとして、両側の親水基は1つの親水性粒子(A及びC)からなり、真ん中の疎水基は3つの疎水性粒子(B)からなる非対称双頭型両親媒性分子、及び、両側の親水基は1つの親水性粒子(A)からなり、真ん中の疎水基は3つの疎水性粒子(B)からなる対称双頭型両親媒性分子を用いる。また、溶媒粒子は1つの親水性粒子(S)でモデル化する。

DPDシミュレーションで用いる粒子間の非結合相互作用は、最大反発力の値 a_{ij} ($i, j = A, B, C$ or S)により記述されるが、本シミュレーションでは特に、A同士の最大反発力の値 a_{AA} の様々な値に対してDPDシミュレーションを行い、自己会合構造の形成過程を解析する。

MDシミュレーションで用いる粒子間の非結合相互作用は、親水性粒子(親水基A, C及び溶媒粒子S)と疎水性粒子Bの間、及び、2種類の親水基AとCの間の相互作用は斥力のみソフトコア・ポテンシャル、親水性粒子同士及び疎水性粒子同士の間の相互作用はレナード-ジョーンズ(LJ)ポテンシャルで表す。本シミュレーションでは特に、親水基Aと溶媒粒子Sの間の相互作用パラメータ $_AS$ の様々な値に対してMDシミュレーションを行い、自己会合構造の形成過程を解析する。

4. 研究成果

双頭型両親媒性分子のDPDシミュレーション及びMDシミュレーションを行い、自己会合構造の形成過程を詳細に解析することにより、以下の成果が得られた。

(1) 屈曲性非対称双頭型両親媒性分子のDPDシミュレーションを様々な a_{AA} の値に対して行った結果、 $a = a_{AA} - a_{CC}$ が小さいときは球状のベシクルを形成するのに対して、 a が大きくなると細長いひも状ミセルを形成することが分かった。

(2) 半屈曲性非対称双頭型両親媒性分子のDPDシミュレーションを様々な a_{AA} の値に対して行った結果、ベシクル、チューブ、チューブ状ミセル、ひも状ミセルなど、多様な形態の自己会合構造が得られた(図1)。

(3) 半屈曲性非対称双頭型両親媒性分子のMDシミュレーションを様々な $_AS$ の値に対して行った結果、初期配置として用いたチューブは、 $_AS$ の値が小さい場合は板状ミセルへ、大きい場合は球状ミセルへと形状変化することが分かった。

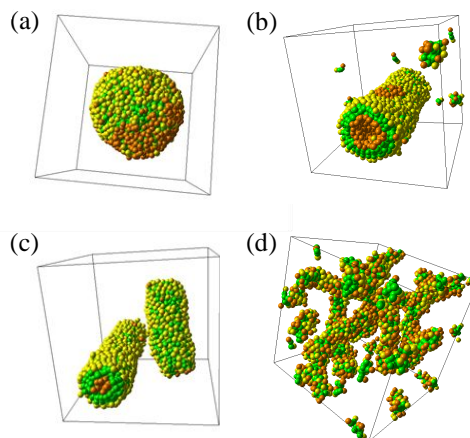


図1. 半屈曲性非対称双頭型両親媒性分子によって形成された自己会合構造。(a) ベシクル、(b) チューブ、(c) チューブ状ミセル、(d) ひも状ミセル。

(4) 屈曲性対称双頭型両親媒性分子のDPDシミュレーションを様々な a_{AA} の値に対して行った結果、 a_{AA} が大きくなるにつれて、自己会合構造の形態が球状ミセルからチューブへ、さらにベシクルへ、最終的にひも状ミセルへと変化することが明らかになった。

(5) 上記(1)より、屈曲性非対称双頭型両親媒性分子の場合、DPDシミュレーションにおいて得られた自己会合構造は、ベシクルとひも状ミセルの2種類のみであった。この結果と上記(4)の結果を比較すると、非対称双頭型両親媒性分子に比べて、対称双頭型両親媒性分子の方が多様な自己会合構造を形成することが明らかになった。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計12件)

1. S. Fujiwara, H. Nakamura, H. Li, H. Miyanishi, T. Mizuguchi, T. Yasunaga, T. Otsuka, Y. Hatano and S. Saito, computational strategy for studying structural change of tritium-substituted macromolecules by a beta decay to helium-3, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., 査読有, Vol.6, No.1, 2019, pp.94 - 99
DOI: 10.15748/jasse.6.94
2. K. Hagita, S. Fujiwara and N. Iwaoka, An Accelerated United-Atom Molecular Dynamics Simulation on the Fast Crystallization of Ring Polyethylene Melts, J. Chem. Phys., 査読有, Vol.150, No.7, 2019, pp.074901-1 - 074901-13
DOI: 10.1063/1.5080332
3. K. Hagita, S. Fujiwara and N. Iwaoka, Structure formation of a quenched single polyethylene chain with different force fields in united atom molecular dynamics simulations, AIP Advances, 査読有, Vol.8, No.11, 2018, pp. 115108-1 - 115108-12
DOI: 10.1063/1.5063438
4. S. Fujiwara, Y. Iida, T. Tsutsui, T. Mizuguchi, M. Hashimoto, Y. Tamura and H. Nakamura, Dissipative Particle Dynamics Simulation for Self-Assembly of Symmetric Bolaamphiphilic Molecules in Solution, Plasma Fusion Res., 査読有, Vol.13, 2018, pp. 3401095-1 - 3401095-6
DOI: 10.1585/pfr.13.3401095
5. L.-C. Valdes, J. Gerges, T. Mizuguchi, and F. Affouard, Crystallization tendencies of modelled Lennard-Jones liquids with different attractions, J. Chem. Phys., 査読有, Vol.148, No.1, 2018, pp. 014501-1 - 014501-11
DOI: 10.1063/1.5004659
6. T. Mizuguchi, Y. Higeta and T. Odagaki, Critical nucleus size for crystallization of supercooled liquids in two dimensions, Phys. Rev. E, 査読有, Vol.95, No.4, 2017, pp. 42804-1 - 42804-6
DOI: 10.1103/PhysRevE.95.042804
7. 藤原進, 高分子構造形成の粗視化分子シミュレーション, プラスチック成形加工学会誌「成形加工」, 査読無, Vol.29, No.2, 2017, pp.57-61
8. T. Mizuguchi, S. Tatsumi and S. Fujiwara, Molecular dynamics study of new phase transition in supercooled cyclohexane, Proceedings of the 35th JSST Annual Conference (JSST 2016) International Conference on Simulation Technology, 査読有, 2016, pp.41-48
9. H. Nakamura, S. Fujiwara, A. M. Ito and S. Saito, Molecular Simulation for Soft and Hard Matters, Proceedings of the 35th JSST Annual Conference (JSST 2016) International Conference on Simulation Technology, 査読有, 2016, pp.1-8
10. S. Fujiwara, Y. Takahashi, H. Ikebe, T. Mizuguchi, M. Hashimoto, Y. Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, Dissipative Particle Dynamics Simulation of Self-Assembly in a Bolaamphiphilic Solution, Plasma Fusion Res., 査読有, Vol.11, 2016, pp.2401073-1 - 2401073-5
DOI: 10.1585/pfr.11.2401073
11. Y. Tamura, H. Nakamura and S. Fujiwara, An Intuitive Interface for Visualizing Numerical Data in a Head-Mounted Display with Gesture Control, Plasma Fusion Res., 査読有, Vol.11, 2016, pp.2406060-1 - 2406060-4
DOI: 10.1585/pfr.11.2406060
12. S. Fujiwara, T. Miyata, M. Hashimoto, Y. Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, Molecular Dynamics Simulation of Phase Behavior in a Bolaamphiphilic Solution, Plasma Fusion Res., 査読有, Vol.10, 2015, pp.3401029-1 - 3401029-4
DOI: 10.1585/pfr.10.3401029

[学会発表](計65件)

1. Hisanori Miyanishi, Hiroaki Nakamura, Takuo Yasunaga, Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi 他, Molecular dynamics simulation of DNA damage by tritium beta-decay, The 27th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research & The 13th Asia

- Pacific Plasma Theory Conference (ITC27 & APPTC2018), 2018
2. Yuichi Tamura, Masahiro Kobayashi, Taisuke Kobayashi, Wataru Omori, Hiroaki Nakamura, Hiroaki Ohtani, Susumu Fujiwara and the LHD experimental group, Volume rendering method applied to 3D edge impurity emission in LHD to produce projection image in arbitrary plane, The 27th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research & The 13th Asia Pacific Plasma Theory Conference (ITC27 & APPTC2018), 2018
 3. Haolun Li, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi 他, Structural change of tritium-substituted polymeric materials by a beta decay: A molecular dynamics study, The 27th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research & The 13th Asia Pacific Plasma Theory Conference (ITC27 & APPTC2018), 2018
 4. Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Haolun Li, Hisanori Miyanishi, Tomoko Mizuguchi, Takuo Yasunaga and Yuji Hatano, Computational strategy for studying structural change of tritium-substituted macromolecules by a beta decay to helium-3, The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018), 2018
 5. Tomoko Mizuguchi, Katsumi Hagita and Susumu Fujiwara, Study of the dynamics of confined water in silica nanopore using the reactive force field, The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2018), 2018
 6. 小原 光徳, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化: デンドリマー世代数の効果, 第 67 回高分子討論会, 2018
 7. 石田 充徳, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 帯電デンドリマー/線状高分子電解質複合体化に及ぼす線状高分子電解質の剛直性の効果, 第 67 回高分子討論会, 2018
 8. Li Haolun, 藤原 進, 水口 朋子 他, トリチウムのヘリウム 3 への壊変によるポリエチレンの構造変化に関する分子動力学シミュレーション, 第 67 回高分子討論会, 2018
 9. 藤原 進, 中村 浩章, 宮西 寿典, 水口 朋子 他, ヘリウム 3 への壊変による高分子材料および DNA の構造変化, プラズマシミュレータシンポジウム 2018, 2018
 10. 藤原 進, 岩岡 伸之, 萩田 克美, ポリエチレン環状鎖の結晶化の分析 II, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018
 11. 中村 浩章, 宮西 寿典, 藤原 進, 水口 朋子 他, トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化の MD シミュレーション, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018
 12. 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 溶液中における対称双頭型両親媒性分子の自己会合: 散逸粒子動力学シミュレーション, 日本応用数理学会 2018 年度年会, 2018
 13. 藤原 進, 飯田祥希, 筒井岳英, 水口 朋子, 橋本 雅人, 対称双頭型両親媒性溶液中における自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 第 67 回高分子学会年次大会, 2018
 14. 水口 朋子, 辰巳 創一, 野田泰斗, 小國正晴, 藤原 進, 拘束系のシクロヘキサンの液液転移, 東京大学物性研究所短期研究会 ガラス転移と関連分野の最先端研究, 2018
 15. 水口 朋子, 辰巳 創一, 須藤 亜紀乃, 野田 泰斗, Zach Evenson, 藤原 進, 拘束系のシクロヘキサンの液液転移に伴うダイナミクスの変化 II, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018
 16. 萩田 克美, 岩岡 伸之, 藤原 進, ポリエチレン環状鎖の結晶化の分析, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018
 17. 藤原 進, 高分子構造形成の分子動力学シミュレーション, シンポジウム「高分子の物性測定とその応用」(招待講演), 2018
 18. 藤原 進, 分子シミュレーションで解き明かすソフトマターの階層構造とダイナミクス, 「自然科学における階層と全体」シンポジウム(招待講演), 2018
 19. 水口 朋子, 分子性液体の液体・液体相転移とそれに伴う構造変化, 第 7 回計算力学シンポジウム(招待講演), 2017
 20. 藤原 進, 高分子構造形成の基礎とシミュレーション手法, S&T 出版セミナー(招待講演), 2017
 21. Susumu Fujiwara, Yoshiki Iida, Takehide Tsutsui, Tomoko Mizuguchi 他, Dissipative particle dynamics simulation for self-assembly of symmetric bolaamphiphilic molecules in a solution, 26th International Toki Conference (ITC-26), 2017
 22. 水口 朋子, 萩田 克美, 藤原 進, メソポーラスシリカ内の水の構造に関するシミュレーション研究, 平成 29 年度繊維学会秋季研究発表会, 2017
 23. Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi 他, Molecular dynamics study of micelle formation in an amphiphilic solution: Classification of micellar shapes, The 36th JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology (JSST2017), 2017
 24. 萩田 克美, 岩岡 伸之, 藤原 進, ポリエチレンの分岐鎖や環状鎖の結晶化挙動の粗視化 MD 解析, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017
 25. 小原 光徳, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化: デンドリマー世代数の効果, 第 66 回高分子討論会, 2017
 26. 筒井 岳英, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 溶液中における双頭型両親媒性分子の自己会合機構: 散逸粒子動力学シミュレーション, 第 66 回高分子討論会, 2017
 27. 筒井 岳英, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 双頭型両親媒性分子の自己会合に及ぼす分子の屈曲性の効果: 散逸粒子動力学シミュレーション, 第 7 回高分子物理学研究会, 2017

28. 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 高分子構造形成の分子動力学シミュレーション, 2017 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 2017
29. T. Mizuguchi, Y. HIGETA and T. Odagaki, Critical nucleus size for crystallization of a supercooled liquid in two dimensions, 8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, 2017
30. 藤原 進, 高橋 雄, 筒井岳英, 水口 朋子, 橋本 雅人, 双頭型両親媒性溶液中における自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 第 66 回高分子学会年次大会, 2017
31. 藤原 進, ソフトマター系における構造形成の分子シミュレーション, シンポジウム「ソフトマターを中心とした材料科学の基礎と応用」(招待講演), 2017
32. 筒井 岳英, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 中村 浩章, 双頭型両親媒性溶液中におけるベシクル・チューブ形成の散逸粒子動力学シミュレーション, 2017
33. Takehide Tsutsui, Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi and Masato Hashimoto, "Self-Assembly of Bolaamphiphilic Molecules in a Solution: Dissipative Particle Dynamics Study, The 1st Japan-Thailand Workshop on Numerical and Experimental Approaches to Nonlinear Problems, 2016
34. Susumu Fujiwara, Molecular Dynamics Simulations of Structure Formation in Soft Matter Systems, The 1st Japan-Thailand Workshop on Numerical and Experimental Approaches to Nonlinear Problems (招待講演), 2016
35. Tomoko Mizuguchi, Soichi Tatsumi and Susumu Fujiwara, Molecular dynamics study of new phase transition in supercooled cyclohexane, The 35th JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology (JSST2016), 2016
36. Hiroaki Nakamura, Susumu Fujiwara, Atsushi M. Ito and Seiki Saito, Molecular Simulation for Soft and Hard Matters, The 35th JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology (JSST2016) (招待講演), 2016
37. 水口 朋子, 辰巳 創一, 藤原 進, 過冷却したシクロヘキサンにおける局所構造変化, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016
38. 鎌田 康平, 藤原 進, 橋本 雅人, 水口 朋子, 青木 隆史, 玉井 良則, 熱応答性高分子の水和構造に及ぼす立体規則性の効果, 第 65 回高分子討論会, 2016
39. 筒井 岳英, 園木 将司, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 半屈曲性双頭型両親媒性分子自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 第 65 回高分子討論会, 2016
40. 藤原 進, 木下 紗由美, 水口 朋子, 橋本 雅人, 帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化: 粗視化分子動力学シミュレーション, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016
41. 藤原 進, 両親媒性溶液中におけるミセル形状転移と動的共存, プラズマシミュレーション シンポジウム 2016, 2016
42. 筒井 岳英, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 溶液中における双頭型両親媒性分子の自己会合構造: 散逸粒子動力学シミュレーション, 第 6 回高分子物理学研究会, 2016
43. 藤原 進, 高分子構造形成の基礎とシミュレーション手法, S&T 出版セミナー (招待講演), 2016
44. Tomoko Mizuguchi, Soichi Tatsumi and Susumu Fujiwara, A simulation study of locally favored structures in supercooled cyclohexane, International Symposium on Advances in Sustainable Polymers (ASP-16), 2016
45. Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi and Masato Hashimoto, Molecular dynamics simulation of micelle formation and micellar shape transition in an amphiphilic solution, International Symposium on Advances in Sustainable Polymers (ASP-16), 2016
46. Yu Takahashi, Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi and Masato Hashimoto, Dissipative particle dynamics simulation of self-assembly in a bolaamphiphilic solution, International Symposium on Advances in Sustainable Polymers (ASP-16), 2016
47. 筒井 岳英, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 溶液中における双頭型両親媒性分子自己会合に及ぼす分子の剛直性の効果: 散逸粒子動力学研究, 2016 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 2016
48. 藤原 進, 高分子構造形成のシミュレーション技術, 技術情報協会セミナー (招待講演), 2016
49. 藤原 進, 高分子構造形成の基礎とシミュレーション手法, R&D 支援センターセミナー (招待講演), 2016
50. 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 両親媒性溶液中におけるミセル形状転移と動的共存, 第 65 回高分子学会年次大会, 2016
51. 藤原 進, 分子シミュレーションで解き明かす高分子の構造形成機構, 関西接着ワークショップ 2015 年度第 4 回研究会招待講演, 2016
52. 藤原 進, 分子シミュレーションによる高分子材料開発の効率化, 2015 年度 KIT-KANEKA 包括連携企画研究交流会 (招待講演), 2016
53. 藤原 進, 高分子系における構造形成の分子動力学シミュレーション, 繊維・高分子に代表されるソフトマターの分子論的ダイナミクスに関する研究会 (招待講演), 2016
54. 水口 朋子, 辰巳 創一, 藤原 進, 分子動力学シミュレーションによる過冷却シクロヘキサ

- ンの局所構造解析, 2015 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, 2016
55. 鎌田 康平, 藤原 進, 橋本 雅人, 水口 朋子, 青木 隆史, 玉井 良則, 熱応答性高分子の水和構造に及ぼす立体規則性の効果, 2015 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, 2016
 56. 高橋 雄, 藤原 進, 橋本 雅人, 水口 朋子, 双頭型両親媒性分子自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 2015 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, 2016
 57. Susumu Fujiwara, Molecular dynamics simulations for structure formation of polymers and self-assembly of amphiphilic molecules, The 5th KIT International Symposium on Advanced Polymer Materials and Fiber Science (招待講演), 2015
 58. Susumu Fujiwara, Yu Takahashi, Hiroki Ikebe, Tomoko Mizuguchi, Masato Hashimoto, Yuichi Tamura, Hiroaki Nakamura and Ritoku Horiuchi, Dissipative particle dynamics simulation of self-assembly in bolaamphiphilic solution, 25th International Toki Conference (ITC-25), 2015
 59. 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 帯電デンドリマー/線状高分子電解質複合体化の粗視化分子動力学シミュレーション, 第 64 回高分子討論会, 2015
 60. 鎌田 康平, 藤原 進, 橋本 雅人, 水口 朋子, 青木 隆史, 玉井 良則, 熱応答性高分子の水和構造に関する分子動力学シミュレーション, 第 64 回高分子討論会, 2015
 61. 高橋 雄, 池部 拓人, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 双頭型両親媒性分子自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 第 64 回高分子討論会, 2015
 62. 鎌田 康平, 藤原 進, 橋本 雅人, 水口 朋子, 青木 隆史, 玉井 良則, 熱応答性高分子の水和構造に関する分子動力学シミュレーション, 第 5 回高分子物理学研究会, 2015
 63. 高橋 雄, 池部 拓人, 藤原 進, 水口 朋子, 橋本 雅人, 双頭型両親媒性分子自己会合の散逸粒子動力学シミュレーション, 第 5 回高分子物理学研究会, 2015
 64. 水口 朋子, 辰巳 創一, 藤原 進, 細孔中のシクロヘキサンで観測される相転移現象のシミュレーション研究, 東京大学物性研究所短期研究会 ガラス転移と周辺分野の科学, 2015
 65. 藤原 進, 磯野 聡士, 関口 真実, 橋本 雅人, 帯電デンドリマー/線状高分子電解質複合体化の分子動力学シミュレーション, 第 64 回高分子学会年次大会, 2015

〔図書〕(計 1 件)

1. 藤原 進 他, 朝倉書店、人物でよむ物理法則の事典、2015(米沢富美子 総編集/辻和彦 編集幹事、分担執筆) pp.38-39, 185, 304-305, 381-382, 414, 425, 453

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cis.kit.ac.jp/~fujiwara/index-j.shtml>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名: 水口 朋子

ローマ字氏名: MIZUGUCHI TOMOKO

所属研究機関名: 京都工芸繊維大学

部局名: 材料化学系

職名: 助教

研究者番号(8桁): 9 0 7 5 8 9 6 3

(2) 研究協力者

研究協力者氏名:

ローマ字氏名:

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。