

令和 5 年 6 月 20 日現在

機関番号：24506

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K15108

研究課題名(和文) ナノ相分離ソフトマター系の分子モデリングと空間分割解析

研究課題名(英文) Molecular Modeling and the Spatial-Decomposition Analyses for Nanostructured Soft Matters

研究代表者

石井 良樹 (Ishii, Yoshiki)

兵庫県立大学・情報科学研究科・特任講師

研究者番号：20806939

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：密度汎関数理論に基づく第一原理計算と分子動力学法を応用することで、ナノ相分離ソフトマターの高精度モデリングに成功した。これにより、非イオン性の官能基による自己組織化構造とイオン性の官能基によるナノドメインの形成を大規模分子シミュレーションから再現することができ、ナノ空間を拡散する水分子やイオンの分子論だけでなく、複雑な自己組織化構造の違いが分子輸送機能に及ぼす影響を解明することができた。さらにそのようなナノ界面の分子描像を実在系の理解と繋げるため、水素結合状態を反映する赤外分光スペクトルの空間分割解析の方法論を新たに確立し、様々なソフトマター界面がもつ溶液化学特性の微視的解明に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では計算化学の方法論をアプローチとして、様々なナノ相分離構造を形成するソフトマターの分子シミュレーション基盤を確立することができた。特に複雑な相互作用が働くことで緩和速度が局所的に遅くなる電解質やガラス、高分子系の分子モデル設計と水素結合特性やナノ構造・物性挙動の解明は学術的意義が高く、自己組織化材料の成果はアメリカ科学振興協会の国際学術誌「Science Advances」に掲載された。さらに本研究の解析手法は、産業界で注目されている機能性材料の計算研究へも現在展開できており、材料設計指針に資する継続的な知見創成も期待される。

研究成果の概要(英文)：In this study, we succeeded molecular modeling of nanostructured soft matters within the framework of first-principles calculation based on density functional theory. This methodology of computational chemistry enables us to reproduce self-assembled structures with aggregation of nonionic moieties and nanodomain formation of ionic moieties for various compounds by using large-scale molecular dynamics calculation. Our simulations revealed molecular insights on water and ions properties in nanoconfined environments of the soft matters, and statistical-mechanical difference of molecular transport phenomena via various self-assembled nanostructures. Additionally, to bridge nanoscale perspectives between experimental measurements and our simulations, the spatially-decomposed methodology of infrared spectroscopy for hydrogen-bonding properties has been newly constructed in this study, which was widely adopted to elucidate solution-chemical properties in various soft matters interface.

研究分野：計算化学

キーワード：ソフトマター 不均一系 ナノ構造 分子動力学 第一原理 分子モデリング 統計力学 輸送係数

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

イオン液体は、非イオン性の疎水基が長くなると疎水基同士がナノスケールで自己組織化し、疎水性ドメインとイオン性ドメインがナノ相分離した高次構造を形成する。このようなナノ相分離ソフトマターでは、疎水基の分子自由度を用いて、非常に多彩なナノ構造形成が可能だけでなく、イオン結合ドメインが水分子やイオンを選択的に輸送する特性をもたらすことが報告されている (Kato et al., *Nat. Rev. Mater.* 2017)。また無機系化合物のみからなるガラスセラミックスでは、イオン結合・共有結合化合物が混和すると局所的に相互作用成分が異なるナノ相分離構造を形成し、イオン結合ドメインは希土類イオンを含有しやすくナノ結晶化しやすいことが報告されている (Murai, Shinozaki et al., *ACS Appl. Electron. Mater.* 2019)。そのため、局所的にイオン結合をもつナノ相分離ソフトマターは、分離処理膜や光機能材料などへの幅広い応用が大きな注目を集めているが、ナノ集合環境の特性や集合過程・分子拡散メカニズムを説明する分子レベルの知見が欠落しており、これらのナノ構造材料を対象とした分子シミュレーションの先行例は極めて少ない。その要因として、イオン性ソフトマターの分子モデリングの難しさ、自己組織化材料や多成分系における計算コストの高さ(長時間・大規模)という計算科学的課題が挙げられる。

2. 研究の目的

そこで本研究では、第一原理計算を用いた分子モデリングと分子動力学(MD)計算の2つをアプローチとして、ナノスケールで不均一化したソフトマター系の機能と分子論の探索を企図した。特に、ソフトマター系の不均一集合によるナノ相分離構造の発現と、不均一環境を構成・拡散する分子輸送メカニズムにそれぞれ焦点を当てた。そのため本研究の第一の目的を、第一原理計算を用いたナノ相分離ソフトマターの高精度な分子モデリング法確立とした。その分子モデルを用いて、イオン液体・イオン液晶などの有機化合物系から高温電解質・ガラスセラミックスなどの無機化合物系も対象としたイオン性ソフトマターの分子シミュレーション基盤構築を主目的に設定した。本研究の第二の目的は、分子物性の空間分割解析法を新たに整備し、ナノ不均一環境における物性・機能の空間依存性を、分子論の視点から解明することとした。この新規解析手法によって、不均一環境の特性を分子構造や相互作用因子に求めて説明することで、ナノ相分離ソフトマターの機能と分子論を記述する理論基盤の確立を目指す計画である。

3. 研究の方法

研究で最初に注目した「自己組織化イオン液晶」の分子モデルは、実験での検討は数多く実施されてきたものの (Henmi, Sakamoto, Kato et al., *Adv. Mater.* 2012; *Adv. Sci.* 2018), 疎水基から親水基までを全原子レベルで顕に扱うシミュレーションの報告例が全く存在しない分子種であった。そこで本研究では、これまで課題代表者がイオン液体系の先行研究で確立してきた凝縮系での自己無撞着モデリング法 (Ishii, Matubayasi, *J. Chem. Theory Comput.* 2019) を応用することで、イオン液晶化合物群に適した分子力場の新規開発から展開した。自己無撞着モデリング法は、MD計算と密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を繰り返して電荷分布を決定することで、凝縮系の多体効果を平均的に取り込むモデリング手法であり、双極子モーメントによる静電相互作用が有意に働く液晶化合物では重要な相互作用因子を考慮できると期待される。本研究ではこのDFT計算を、周期境界条件を課した32イオンペア(4608原子)の規模を標準系として実施した。電子状態計算にはDZVP基底によるGaussian plane wave法を適用し、カットオフエネルギーは400 Ryとした。各原子の電荷はBlöchl法を用いて評価した。本研究のDFT計算はCP2K 6.1-branchを用いて実行した。MD計算プロセスで適用とする分子力場は、イオン液体系で検証してきたOPLS/GAFFとし、van der Waalsパラメータは固定のまま各原子に割り振る電荷パラメータを自己無撞着モデリング法の反復操作で決定した。これにより、不均一に分子種・官能基が分布するナノ相分離ソフトマターで示す多体効果を考慮できる新規分子力場の開発を試みた。これらの第一原理計算による分子モデリングは、本課題予算で入手した計算機資源と研究拠点・兵庫県立大学に設置されたスーパーコンピュータを使って実施した。なお本研究では、このイオン液晶化合物の他にも、生体適合性高分子の一種であるPoly(2-methoxyethyl acrylate)(PMEA)の分子モデリングや無機化合物系との学理接続を想定してアルカリハロゲン化物、アルカリ土類ハロゲン化物系高温電解質の分子モデリングも併せて実施した。さらに本研究では、不均一分子集合環境における分子・イオン種の構造・物性相関を検討するため、赤外分光スペクトルの空間分割解析手法も新たに構築した。本手法は水分子のOH伸縮振動モードに着眼しており、静電相互作用に基づくOH伸縮振動数の理論化学的予測式 (Torii, Ukawa, *J. Chem. Phys. B* 2021) を基幹として開発した。この解析手法は水分子の赤外分光スペクトルに限定されるが、ナノ不均一環境でも効率よくサンプリング可能な計算化学手法となっており、また任意の物理量を変数として加えた空間分割赤外分光バンド解析も可能となる。したがって、水分子やイオンの構造・物性挙動を特定のナノ構造近傍で議論可能な点は大きな長所となる。

次に本研究の分子モデリングで得られたイオン液体、イオン液晶や高分子、高温電解質・ガラ

ス系の分子力場を基にして、大規模系の MD 計算を実行した。特にイオン液晶系では、6 万原子規模となる 450 イオンペアの計算規模で双連続型自己組織化構造の検証を進め、10-16 万原子規模となる 864・1152 イオンペア系でカラムナー型自己組織化構造の検証を進めた。このうち双連続構造の観測には、500 K の高温から 300 K まで 250 ns かけて冷却することで、自発的なナノチャンネル構造の形成の可否について検証した。カラムナー構造の観測には、初期構造として作成した 1 本のナノチャンネルをスーパーセルにして複製し、その構造を 50 ns かけて 300 K で平衡化して検証した。また高分子 PME A 系においては、6 万原子規模の MD 計算を標準系とし、同じく 500 K から 300 K へと平衡化し、高分子内部の微小空間に存在する水分子の水素結合状態や安定性と赤外スペクトルの空間分割解析を実施した。これらの計算は、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) が運用する令和 2-4 年度 HPCI システム利用一般課題の枠組みで割り振られた国内のスーパーコンピュータ資源・北海道大学 Grand Chariot を用いて実施した。

4. 研究成果

(1) ナノ相分離ソフトマターの新規分子力場開発

周期境界条件下の DFT 計算で得られた自己組織化イオン液晶系の分子電荷は、1 回目のモデリングで過剰に小さい電荷を示すが、2 回目やや増加し、3 回目以降は良い収束性を示した。この傾向は室温イオン液体でも共通であるが、液晶機能を発現する疎水性官能基をもたないイオン液体分子と比べると、イオン液晶分子の分子電荷の絶対値はより大きくなった。これは非イオン性官能基がイオン液体の一部に置換されることで、イオン性官能基近傍の電子密度がより局在化しやすくなることと考えられる。この電荷分布の偏りの影響を詳細に調べるため、凝縮系におけるイオンの電荷移動と分子内分極の影響を調べた。その結果、凝縮系における電子密度変化によって電荷移動が大きくなるほど、イオン液晶分子の電荷の偏りが大きく変化し、組成ごとに得られた自己無撞着モデリングによる原子電荷の違いは、凝縮系の分極効果をイオン液体系と同様に考慮できていることが分かった。また自己無撞着モデリングで決定された電荷分布で表現される双極子モーメントは、DFT 計算で得られた双極子モーメントと非常によく一致しており、イオン性官能基の違いを考慮できていることが分かった。双極子モーメントの一致度も、無機イオン系の分極力場と同程度であることから、非分極分子力場としての精度も高いことが期待される、一連の自己組織化イオン液晶化合物に適用可能な分子力場群を構築した (Ishii, Matubayasi, Washizu, *J. Phys. Chem. B* 2022)。さらに無機材料系においては、点双極子モーメントを頭に掲げる分極イオンモデルを用いて、アルカリ土類ハロゲン化物の分極力場を設計しつつ、超イオン伝導相を再現可能なことを検証した。さらに新たにガラスセラミックス組成との転用可能性を維持するようにチューニングを施し、オキシハロゲン系に適用可能な分極力場群を新たに開発した (Shinozaki, Ishii, Sukenaga, Ohara, *ACS Appl. Nano Mater.* 2022)。

(2) ナノ相分離ソフトマターの大规模 MD シミュレーションによるナノ構造解析

次に、上述の自己無撞着モデリングで得られた分子力場を用いて自己組織化イオン液晶化合物の大规模 MD 計算を行い、高温相を対象として分子集合構造形成メカニズムを調べた。図 1 に、イオン液晶化合物の分子構造と GAFF-DFT 力場で得られた自己組織化液晶のイオン伝導率とナノ相分離構造のスナップショットを示す。自己組織化イオン液晶の場合、室温イオン液体よりもイオン性官能基が占める体積が小さいためイオン伝導率の値は低くなり、その傾向も実験値と一致する。このイオン液晶系ではイオン性官能基の間に実効的に働く引力が強なることから、室温イオン液体系と共通する小さいアニオン種 BF_4^- のダイナミクスはイオン液体系よりも非常に遅くなることで、イオン伝導率が低下していることが分かった。すなわち自己組織化イオン液晶では、イオン性官能基の間に働く引力が高次構造の維持に寄与することでイオンが拡散しづらくなり、イオン伝導率の低下をもたらすと解釈される (Ishii, Matubayasi, Washizu, *J. Phys. Chem. B* 2022)。

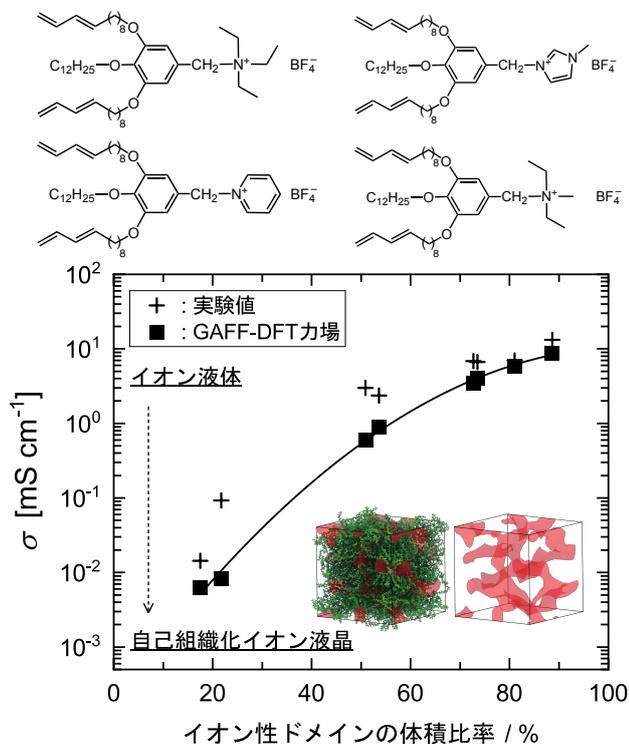
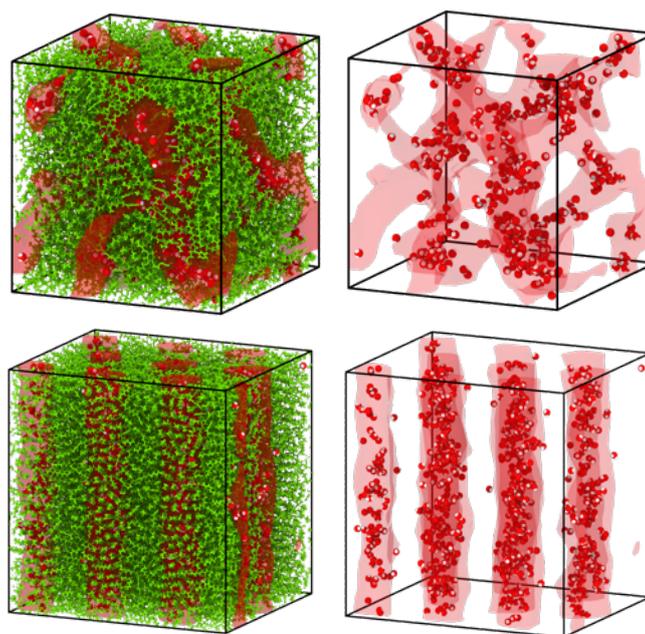


図 1: イオン液晶化合物の分子構造 (上図) と MD 計算で得られたイオン伝導率のイオンドメイン体積比率依存性 (下図)。挿入図は分子集合状態の全容と、イオンドメインのみを描画したスナップショット。

次に、自己組織化イオン液晶の大規模 MD 計算を室温環境で実行し、実験から報告されているナノ構造の再現性を検証した。実験的には、ジャイロイド型の大連続構造とヘキサゴナル型のカラムナー構造が報告されているが、本研究の MD 計算ではそれらの両方を再現することができた。図 2 に大連続構造とカラムナー構造となった自己組織化イオン液晶のスナップショットを示す。このとき、イオン性官能基が集合したナノドメイン構造も図 2



(右上, 右下) のように観測でき、大連続構造とカラムナー構造がそれぞれ 3 次元および 1 次元に連続したナノチャネルの再現も確認できた。これらの自己組織化構造に対して、X 線構造因子と局所密度分布を解析したところ、どちらも相関距離やナノ空孔サイズの実験値と良い一致を示すことが分かった。ここで水分子を含有させると、ナノチャネル内部に自発的に留まり、水素結合ネットワークを形成して安定化した。その状態を詳しく調べたところ、イオン性官能基と水分子の両方と接触する状態 (interfacial state) と、水分子とのみ接触する状態 (bulk-like state) に分類できた。このナノチャネル内では、水分子のエネルギーは純水に比べて弱く、濃度が増加すると bulk-like state が安定化した。さらに溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ は、水が増えると純水と同程度の安定性を示した。ここで水相からイオン液晶相への方向への移行自由エネルギー $\Delta\Delta\mu$ に対するポテンシャルエネルギーの寄与は、純水からイオン液晶に移行すると大きくなり、移行自由エネルギーを不安定化させるように寄与する。一方で、ナノチャネルへの溶解過程に必要な空孔形成エネルギーの寄与はイオン液晶中の方が小さい値を示したことから、ナノチャネルでは空孔形成の容易さが移行自由エネルギーを安定化させるように寄与することを示唆している。したがってナノチャネル内部では、これらの自由エネルギーの寄与が競合的に働くことで、水 1 分子の安定性はイオン液晶と純水で同程度となることが分かった。さらにナノチャネル内での水分子の拡散性能を評価したところ、水が低濃度の領域では水分子はナノチャネルにかかわらず等方的に拡散するものの、水の割合が増えて水素結合ネットワークを形成すると、ナノチャネルに沿った拡散が高くなることが分かった。このとき、ナノチャネルの配向に並行方向の拡散性は、垂直な方向に比べて 2.5 倍以上となっており、その拡散係数も純水より一桁小さい値となることが分かった。その一方で、等方性を仮定して得られる水分子の拡散係数は、大連続構造とカラムナー構造とで一致することから、ナノチャネル内での拡散性はナノ相分離構造の形状によらずに誘起されるが、大連続構造ではどの方向で観測しても、3 次元に連続したナノ構造がその拡散異方性を打ち消すことが分かった。本研究成果は高い注目を集め、アメリカ科学振興協会の国際学術誌「Science Advances」に掲載され、カバーイメージを飾った (Ishii, Matubayasi, Watanabe, Kato, Washizu, *Sci. Adv.* 2021, 図 3)。またオキシハロゲン系の分子シミュレーションに対しても、イオン結合と共有結合の結合ネットワーク解析を展開したところ、それぞれの成分が大連続的に連続していることが分かった。したがってオキシハロゲン系無機ガラスの内部では、ナノ結晶化するアルカリ土類ハロゲン化物によるイオン結合成分が連続して安定化することが示唆された (Shinozaki, Ishii, Sukenaga, Ohara, *ACS Appl. Nano Mater.* 2022)。

図 2: 大規模 MD シミュレーションで得られた自己組織化イオン液晶化合物の大連続構造 (上図) とカラムナー構造 (下図)。上下図それぞれの左図は、非イオン性の疎水基が集合して形成する疎水基ドメインを線状に描画し、右図では疎水基ドメインを消してイオン性官能基から成る空間を連続的に描画している。

水分子のエネルギーは純水に比べて弱く、濃度が増加すると bulk-like state が安定化した。さらに溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ は、水が増えると純水と同程度の安定性を示した。ここで水相からイオン液晶相への方向への移行自由エネルギー $\Delta\Delta\mu$ に対するポテンシャルエネルギーの寄与は、純水からイオン液晶に移行すると大きくなり、移行自由エネルギーを不安定化させるように寄与する。一方で、ナノチャネルへの溶解過程に必要な空孔形成エネルギーの寄与はイオン液晶中の方が小さい値を示したことから、ナノチャネルでは空孔形成の容易さが移行自由エネルギーを安定化させるように寄与することを示唆している。したがってナノチャネル内部では、これらの自由エネルギーの寄与が競合的に働くことで、水 1 分子の安定性はイオン液晶と純水で同程度となることが分かった。さらにナノチャネル内での水分子の拡散性能を評価したところ、水が低濃度の領域では水分子はナノチャネルにかかわらず等方的に拡散するものの、水の割合が増えて水素結合ネットワークを形成すると、ナノチャネルに沿った拡散が高くなることが分かった。このとき、ナノチャネルの配向に並行方向の拡散性は、垂直な方向に比べて 2.5 倍以上となっており、その拡散係数も純水より一桁小さい値となることが分かった。その一方で、等方性を仮定して得られる水分子の拡散係数は、大連続構造とカラムナー構造とで一致することから、ナノチャネル内での拡散性はナノ相分離構造の形状によらずに誘起されるが、大連続構造ではどの方向で観測しても、3 次元に連続したナノ構造がその拡散異方性を打ち消すことが分かった。本研究成果は高い注目を集め、アメリカ科学振興協会の国際学術誌「Science Advances」に掲載され、カバーイメージを飾った (Ishii, Matubayasi, Watanabe, Kato, Washizu, *Sci. Adv.* 2021, 図 3)。またオキシハロゲン系の分子シミュレーションに対しても、イオン結合と共有結合の結合ネットワーク解析を展開したところ、それぞれの成分が大連続的に連続していることが分かった。したがってオキシハロゲン系無機ガラスの内部では、ナノ結晶化するアルカリ土類ハロゲン化物によるイオン結合成分が連続して安定化することが示唆された (Shinozaki, Ishii, Sukenaga, Ohara, *ACS Appl. Nano Mater.* 2022)。

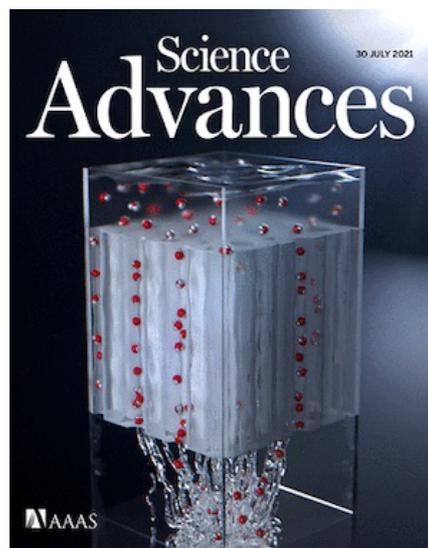


図 3: 本研究成果が掲載された国際学術誌「Science Advances」第 7 卷 31 号のカバー。

(3) ナノ相分離ソフトマターにおける空間分割解析

本計画の後半では、新規構築した空間分割赤外 (IR) バンド解析法の妥当性を確立するため、図 4 のように高分子 PMEA 中の水分子が示す OH 伸縮振動モードの IR バンドの分子論探索を進めた。膨潤率が 0.3 wt% から 10.6 wt% の含水率範囲で得られた IR バンドを解析したところ、含水率が増加するにつれてピーク振動数が図 4 のように 3608 cm^{-1} から 3407 cm^{-1} へと連続的に減少した。この傾向は放射光実験で得られた主要成分の変化 3610 cm^{-1} から 3430 cm^{-1} への低波数シフトとよく一致し (Ikemoto, Tanaka, Ishii, Washizu, Torii et al., *J. Phys. Chem. B* 2022), 従来の計算手法を用いる MD 計算の先行研究とも概ね合致している。また TIP4P/2005 のみの純水系に対して、IR バンドのピーク振動数を同様に解析したところ、低振動数領域の赤外強度をやや過大評価するものの、ピーク振動数は実験値とよく一致したことから、静電相互作用と振動数の理論的關係を用いた解析は、水分子の OH 伸縮振動モードに由来する IR スペクトルの定量的予測に有効であり、その適用範囲は純水系だけでなく機能性材料中に不均一分布した水分子に対しても適用可能であることがわかった。そこで、高分子と水の相互作用エネルギー u_p を空間情報を反映する新しい変数として設定することで、空間分割 2 次元 IR スペクトル $I(\omega_{\text{OH}}, u_p)$ を新たに解析した。図 3 は横軸を OH 伸縮振動の IR 振動数、縦軸を高分子-水間の相互作用エネルギーを反映したものに対応し、高分子との相互作用が弱くなるほど水分子の OH 伸縮振動モードが低波数シフトすることが分かった。これらの結果から、水素結合の解離、すなわち PMEA と水分子の間の水素結合数の低下が IR バンドの低波数に影響していることが分かった。現在は、これらの研究成果をより広範なソフトマターのナノ構造および界面系へと議論を進展させており、今後も材料界面で発現する様々な機能に対する水・イオンの役割を可視化し機能材料の設計にフィードバックに繋がる継続的な波及効果が期待される。

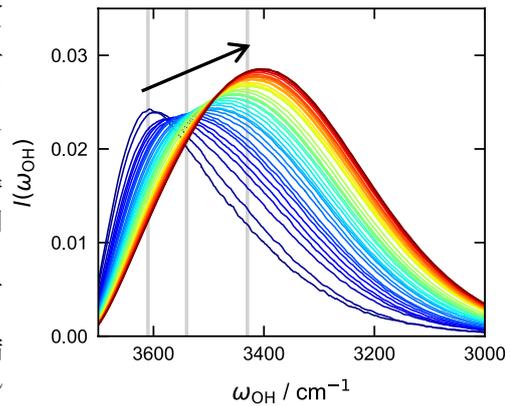
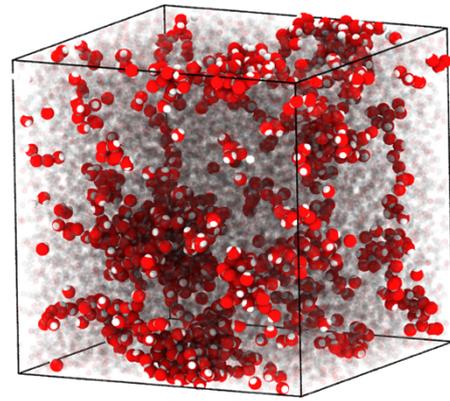


図4: 高分子 PMEA 中の水分子のスナップショットと (上図), 静電相互作用解析から得られた水分子の OH 伸縮振動モードの IR バンド (下図)。下図の矢印は、含水率の増加方向を表す。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Ishii Yoshiki, Matubayasi Nobuyuki, Watanabe Go, Kato Takashi, Washizu Hitoshi	4. 巻 7
2. 論文標題 Molecular insights on confined water in the nanochannels of self-assembled ionic liquid crystal	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eabf0669-1 ~ 14
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1126/sciadv.abf0669	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Ishii Yoshiki, Murakami Tomohiro, Ohtori Norikazu	4. 巻 346
2. 論文標題 Molecular size and shape effects: Tracer diffusion and the Stokes-Einstein relation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Liquids	6. 最初と最後の頁 118235 ~ 118235
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.molliq.2021.118235	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shinozaki Kenji, Ishii Yoshiki, Sukenaga Sohei, Ohara Koji	4. 巻 5
2. 論文標題 Ultrafast Nanocrystallization of BaF ₂ in Oxyfluoride Glasses with Crystal-like Nanostructures: Implications for Upconversion Fiber Devices	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 4281 ~ 4292
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acsnm.2c00205	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 石井良樹	4. 巻 1
2. 論文標題 溶液物性のモデリングと不均一分子集合系への展開	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 溶液化学研究会誌	6. 最初と最後の頁 17-21
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Yoshiki, Matubayasi Nobuyuki, Washizu Hitoshi	4. 巻 126
2. 論文標題 Nonpolarizable Force Fields through the Self-Consistent Modeling Scheme with MD and DFT Methods: From Ionic Liquids to Self-Assembled Ionic Liquid Crystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4611 ~ 4622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c02782	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 石井良樹	4. 巻 24
2. 論文標題 自己組織化イオン液晶が形成するナノ界面のモデリングと水分子のダイナミクス	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 152 ~ 159
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11436/mssj.24.152	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 石井良樹	4. 巻 12
2. 論文標題 自己組織化イオン結晶におけるナノ相分離様態と分子輸送特性の分子動力学研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 サイバーメディアHPCジャーナル	6. 最初と最後の頁 37 ~ 40
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計29件 (うち招待講演 9件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 鷲津仁志
2. 発表標題 ナノ水圏材料の分子モデリングと局所物性解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Nhu Minh Tue Le, Van Sang Le, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Structural Properties of Water Molecules around the PEG and alpha-Cyclodextrin onto Gold Surface by MD Simulation
3. 学会等名 第70回高分子学会年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 PMEAと水の相互作用の分子動力学解析：水の状態と局所物性
3. 学会等名 第70回高分子討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 溶液物性のモデリングと不均一分子集合系への展開
3. 学会等名 第43回溶液化学シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 機能性ナノ分子の材料探索に向けたスパコンによる分子モデリングと大規模MD シミュレーションの事例紹介
3. 学会等名 新化学技術推進協会(JACI) 先端化学・材料技術部会新素材分科会 講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 鷲津仁志
2. 発表標題 DFTとMDの自己無撞着モデルに基づく自己組織化イオン液晶の物性解析
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学計算を用いた高分子内部における水分子の相互作用とIRバンドの解析
3. 学会等名 2021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
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶の計算科学的解析に向けたスパコンによる分子モデリングと大規模MDシミュレーション
3. 学会等名 第31回日本MRS年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Modeling of Ionic Liquids and their Analogues via Self-Consistent Scheme with MD and DFT Methods
3. 学会等名 The XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Mathieu Salanne, Norikazu Ohtori
2. 発表標題 Evaluation of Transport Properties of Molten Alkaline-Earth Halides and Oxyhalides Using Polarizable Ion Model
3. 学会等名 7th Asian Conference on Molten Salts Chemistry and Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Nobuyuki Matubayasi, Takashi Kato, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Insights on Ionic Nanochannel and the Hydration Properties of Self-Organized Ionic Liquid Crystals
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 不均一分子集合系のモデリングと分子輸送機能の解明
3. 学会等名 電気化学会第89回大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷺津仁志
2. 発表標題 高分子系における水分子の静電相互作用解析と赤外バンドの考察
3. 学会等名 日本化学会第102年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 原田慈久, 加藤隆史, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いた自己組織化イオン液晶のナノチャンネルにおける水和様態解析
3. 学会等名 化学工学会第86年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 原田慈久, 加藤隆史, 鷺津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶のナノチャンネルにおける水和様態の分子動力学解析
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 自己組織化イオン結晶におけるナノ相分離様態と分子輸送特性のインタープレイ
3. 学会等名 2020年度大阪大学サイバーメディアセンター公募型利用制度成果報告会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 輸送に関する分子動力学解析と界面への応用
3. 学会等名 第10回分子シミュレーションのトライボロジーへの応用研究会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹
2. 発表標題 ナノ構造材料の分子シミュレーションによる構造・物性解析
3. 学会等名 第10回フォトニクスのための材料研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶の全原子分子モデリング：1Dおよび3Dナノチャネルの分子輸送機能解析
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 Confined Water inside the Nanochannels of Self-Assembled Ionic Liquid Crystal via MD and DFT Simulations
3. 学会等名 イオン液体Workshop2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶の全原子分子シミュレーション：ナノチャネル構造と分子輸送解析
3. 学会等名 2020年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶のナノチャネルの中での水分子のダイナミクス
3. 学会等名 溶液化学研究会若手の会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 ナノチャネルを形成する自己組織化イオン液晶の全原子分子シミュレーション
3. 学会等名 第69回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 Molecular Modeling of Self-Organized Ionic Liquid Crystals: Nanochannel and the Hydration Properties
3. 学会等名 第69回高分子学会年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Ishii, K. Kawakita, H. Koshima, H. Washizu
2. 発表標題 On the aggregation and thermodynamic properties of organophosphate-based additives in a base oil observed by molecular dynamics simulation
3. 学会等名 MIPE 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居 肇, 池本夕佳, 原 光生, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子・液晶中の水分子集団の振動現象に関する実験・計算の複合的アプローチ
3. 学会等名 第71回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子中の水分子集団が示すOH伸縮振動モードの空間分割IRバンド解析
3. 学会等名 第44回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子中に不均一分布した水分子に対するOH伸縮振動モードの空間分割解析
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子と水のナノ界面における水分子の相互作用とOH伸縮振動モードの空間分割解析
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 石井良樹	4. 発行年 2022年
2. 出版社 シーエムシー出版	5. 総ページ数 320
3. 書名 第1編第5章3 “イオン液体の分子モデリングと大規模シミュレーションへの展開”, pp.62-68, 監修:大内幸雄「イオン液体の実用展開に向けた最新動向」	

〔産業財産権〕

〔その他〕

ホームページ https://yoshiki141.org/hp ResearchMap https://researchmap.jp/yoshiki_ishii/ Google Scholar https://scholar.google.co.jp/citations?user=23VEd1gAAAAJ&hl=en ResearchGate https://www.researchgate.net/profile/Yoshiki_Ishii2 大阪大学サイバーメディアセンター HPSC News「水処理膜を透過する水やイオンの分子シミュレーション ～計算機シミュレーションによる分子機能予測～」 2021年9月15日 http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/hpsc-news/vol11/ プレスリリース「水処理膜のナノチャネルがもつ特性を計算科学で解明：水分子の動きを活発化させる水素結合の仕組み」, 2021年7月28日. https://www.nikkei.com/article/DGXLRS615441_Y1A720C2000000/ https://research-er.jp/articles/view/101696 https://www2.hyogo-c.ed.jp/weblog2/board-bo/press/2021/07/水処理膜のナノチャネルがもつ特性を計算科学で/

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------