

特集序言

「界面科学とシミュレーション」の 企画と編集にあたって

柿澤 恭史・森田 友岳

(ライオン株式会社・産業技術総合研究所)

1913年にイギリスの物理化学者 McBain によってはじめて提唱された界面活性剤ミセルのモデル図、すなわちマッチ棒を放射状に並べたように描かれる有名なモデル図は、今日でも多用されています。それから100年余、様々な散乱法、分光法、観察法など実験的な観測と理論の精緻化に関わる研究がなされてきましたが、平衡状態にある分子集合体を観測するためには時間と空間の限界を極限まで縮小する必要があります。このように、



水溶液中の分子集合体や高分子、コロイド分散系やその流動現象を実像で捉えることは難しくモデル図として示されますが、その正確さは特に重要になってきます。そこで、原子ならびに分子の物理的な動きのコンピューターシミュレーション手法である分子動力学法は、分子レベルでの静的、動的安定構造やダイナミクスを解析する手法として、水溶液中での状態解明に期待されていましたが、莫大な数の水分子が存在する複雑な水溶液系の性質を探るには大きな課題がありました。

しかし、近年の計算機の高性能化とアルゴリズムの改良によって分子動力学シミュレーションは格段に進歩しています。そこで、コロイド界面科学分野における最近のシミュレーションの活用事例をご紹介いただき、油化学分野研究のさらなる発展に繋げたく、本特集では最新の理論と研究事例についてご執筆をいただきました。安藤先生・岡崎先生には、分子動力学シミュレーションの原理と、それをを用いたミセル、脂質二重層膜、ウィルスカプシドの溶液中での分子動力学シミュレーションの実際を解説いただきました。田中先生・館野先生には、流体粒子ダイナミクス法の原理とコロイド分散系の相分離現象の予測に応用した例を紹介いただきました。増淵先生には、レオロジーシミュレーションについて、長時間の分子運動を扱うために必要な粗視化に着目し現象論的および分子論的な二つの立場から説明いただきました。青柳先生には、高分子の粗視化分子モデルの概念と、粗視化分子動力学シミュレーションの例として熔融状態における線形および分岐ポリマー鎖のサイズ、固体壁近くの熔融高分子およびグラフト鎖の変形、マイクロ相分離構造におけるブロックコポリマーのコンフィグレーションに関する検討例を紹介いただきました。ご多忙の中、本特集のご執筆にご理解、ご協力いただきました先生方に深く感謝申し上げます。