■研究最前線

機能性材料を理論から解き明かす研究 •Research to Uncover Functional Materials from Theory

スーパーコンピュータ「富岳」で原子や分子の世界をシミュレート

燃料電池や高分子微粒子の開発に貢献し、環境悪化を食い止める

The World of Atoms and Molecules with the supercomputer Fugaku

Contributing to the development of fuel cells and polymer nanoparticles for a more sustainable future

◉化学生命工学部 藤本 和士 准教授

• Faculty of Chemistry, Materials and Bioengineering —— Associate Professor *Kazushi Fujimoto*

電気を通す、ガスを通さない、保温効果がある——。さまざまな機能を持つ材料のおかげで、私たちは便利な暮らしを享受できている。これら「機能性材料」の開発では、目に見えない原子の世界で何が起きているのかを解明することも重要だ。化学生命工学部の藤本和士准教授はスーパーコンピュータで原子の動きをシミュレートし、燃料電池や高分子微粒子などの開発を理論的に支えている。

The conveniences of our daily life—like electricity, clean air, and warmth—are supported by special materials that can carry electricity, stop gases from passing through, and keep heat inside. To make these functional materials, we need to understand what is happening with atoms, which are too small to see. Associate Professor Kazushi Fujimoto of the Faculty of Chemistry, Materials and Bioengineering uses supercomputers to show how atoms move, giving clues that help scientists create new technologies such as fuel cells and tiny particles called polymer nanoparticles.

スーパーコンピュータ「富岳」
supercomputer Fugaku

写真提供：共同通信社
photo courtesy of Kyodo News

■専門分野は理論化学。MD計算とは

——研究分野について教えてください。

理論化学が専門です。化学には他に有機化学や無機化学という分野があり、さまざまな機能を持った材料(機能性材料)を作っています。例えば、服に使われる吸湿発熱の機能を持った素材もその一つです。これらの機能性材料について、「なぜ、そのような性質を持つのか」を調べる学問が理論化学です。

私が所属する化学物質工学科には40人ほどの教員が在籍しており、専門は多種多様です。共通点といえば、全員が原子と分子に対する愛があるということです。

私は、材料の機能について「この分子はこのような構造なので、この機能があります」ということを明らかにするため、原子や分子のレベルで調べています。

——どのように調べるのですか？

X線や光を使う測定など、方法はいくつかあります。その中でも、私は計算科学を利用しています。分子の動きを直接シミュレーションする「分子動力学(MD)計算」という手法でアプローチしています。MD計算は、物質を構成する原子一つ一つの動きをスーパーコンピュータで計算し、原子の位置やエネルギーの変化を追跡する最先端のシミュレーション手法です。

■燃料電池の開発に貢献

——理論化学を用いてどのような研究に取り組んでいるか教えてください。

主に燃料電池に使用する材料の研究です。燃料電池は水素と酸素を反応させて電気を得る仕組みになっていて、正極と負極の二つの電極の間に挟まれた「高分子」電解質の中を水素イオン(H^+)が移動します。このため、この高分子には軽量で水素イオンが移動しやすいなどの性質が求められます。燃料電池の開発メーカーは、試行錯誤を繰り返して性能の高い材料を開発しています。私たちは、高分子内で実際に何が起きているのかをシミュレートし、開発に役立ててもらうことを目的にしています。

■Field of expertise: Theoretical Chemistry – What is MD Simulation?

— Please tell us about your research field.

My specialty is theoretical chemistry. In chemistry, there are many different fields, such as organic chemistry and inorganic chemistry, where researchers create materials with useful functions. For example, some materials used in clothing can absorb moisture and release heat. Theoretical chemistry, on the other hand, explores why materials have the properties they do.

In the Department of Chemistry and Materials Engineering, where I work, about 40 faculty members cover a wide range of specialties. What we all share in common is a fascination with atoms and molecules.

My own research looks at materials at the atomic and molecular level to reveal how their structures are connected to their functions.

— How do you investigate these phenomena?

There are many ways to study materials, such as using X-rays or light. Another powerful tool I use is computational science. My approach is called molecular dynamics (MD) simulation, which directly models how molecules move. This cutting-edge technique employs supercomputers to calculate the motion of individual atoms within a substance, allowing us to track changes in their positions and energy over time.

■Contribution to fuel cell development

— What can you tell us about research you're conducting using theoretical chemistry?

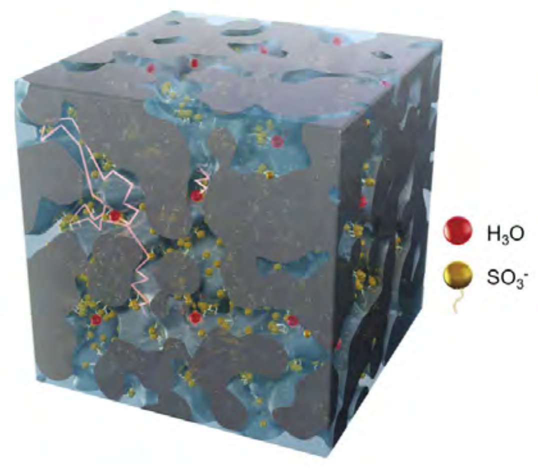
My main research focuses on materials used in fuel cells. Fuel cells generate electricity by combining hydrogen and oxygen. In this process, hydrogen ions (H^+) pass through a polymer electrolyte placed between two electrodes, the cathode and the anode. To function effectively, these polymers must be lightweight and allow hydrogen ions to move smoothly. Manufacturers work to create high-performance materials through repeated trial and error. Our aim is to use simulations to uncover what is happening inside the polymer, so that our results can help guide material development.

— What have you discovered through your research?

Inside a polymer, the structure can be imagined like water flowing through the gaps of a complex jungle gym. Hydrogen ions move within this water. The jungle gym also has sulfonic acid groups (SO_3^-), which carry a negative charge and attract the positively charged hydrogen ions. Our MD simulations showed that the speed of hydrogen ion movement depends on both the width of the water channels and the

富岳 Fugaku

■研究最前線



燃料電池の構造(イメージ図)
Structure of a fuel cell (schematic diagram)

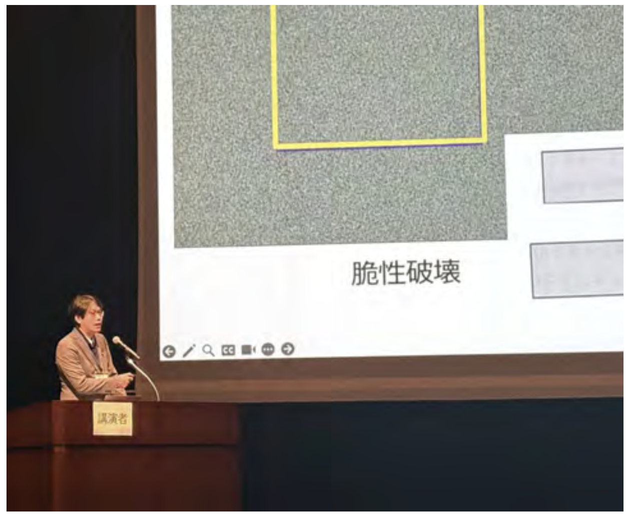
――研究の結果、どのようなことが分かりましたか？

高分子の中は、複雑なジャングルジムの間を水が通っているような構造になっています。その水の中を水素イオンが移動します。このジャングルジムには、マイナスの電荷を持ったスルホン酸基(SO_3^-)という部分もあって、これがプラスの電荷を持った水素イオンを引き付けます。MD計算による解析の結果、水素イオンが移動する速さは、水の通路の幅とSO_3^-の数が関係していることが判明しました。こういった研究が、燃料電池の軽量化と発電効率の改善に貢献できると考えています。

――シミュレーションに、世界最高水準のスーパーコンピュータ「富岳」を使っているのですね。

コンピュータの性能は高ければ高いほど良いです。調べている高分子の構造は不均一になっていて、水の分布も、水たまりのようになったところや曲がりくねった経路があって非常に複雑です。そのため、一部分について原子の動きをシミュレートしただけでは現実を再現したとは言えません。シミュレートする原子が増えると、スーパーコンピュータが必要になってきます。

「富岳」のような高性能のコンピュータであれば、今までチャレンジしたことがないくらいの大きな計算が可能となり、新しいサイエンスを見いだすことができます。逆の見方をすると、コンピュータの性能が飛躍的に向上したため、MD計算の分野が発展したと言えます。



▲分子シミュレーション討論会での研究発表
Research Presentation at the Molecular Simulation Symposium

■環境に優しい高分子微粒子

――他にはどのような研究をしていますか？

これも「富岳」を利用した研究なのですが、岡山大学の鈴木大介教授が代表を務めるプロジェクトで、環境配慮型の高分子微粒子の開発に取り組んでいます。

高分子微粒子は、数十ナノメートル(ナノは10億分の1)から数マイクロメートル(マイクロは100万分の1)程度の大きさです。表面がフィルムのようにつるんとした包装紙がありますが、実はこれは表面に高分子微粒子を貼り付けてあります。従来の高分子微粒子はもろいため、あまり用途がありませんでしたが、鈴木教授らは強靭な高分子微粒子を発見し、さまざまな応用を進めています。

私たちは「なぜ強靭なのか」について解析し、さらに使用後に分解する機能を付加する共同研究も行っています。開発に成功すれば、使用後に再利用が可能な、環境に配慮した材料となります。

――MD計算の利点は何でしょう。

原子や分子の動きを直接追跡でき、その物質に特定の機能がある理由を明確にできます。すべての物質について可能というわけではありませんが、分子の構造から機能を解析できたときには達成感を得られます。

また、現実にはまだ存在しない分子構造をシミュレートし、どのような性質を持つか調べることもできます。その結果を基に実験すれば、開発のスピードを上げることが可能です。

■エネルギーや環境分野で研究を続けたい

――今後はどのような研究をしていく予定ですか？

現在取り組んでいる燃料電池と高分子微粒子も含まれますが、やはり環境やエネルギーの分野の研究を続けたいですね。

今、地球環境が大きく変化しています。例えば、夏は以前より暑くなったと体感しています。また、不漁によってサンマの値段が高騰するなど、食卓にも影響が表れています。環境問題は絶対に無視してはいけません。解決策としてはエアコンを全部切るのが最も早いのですが、それはやはり無理でしょう。我慢せずに解決する道を探るのが良いと思います。そのためにも、再生可能エネルギーを効率良く活用し、環境への負荷が少ない機能性材料を開発することで、持続可能な未来社会づくりに貢献していきたいです。

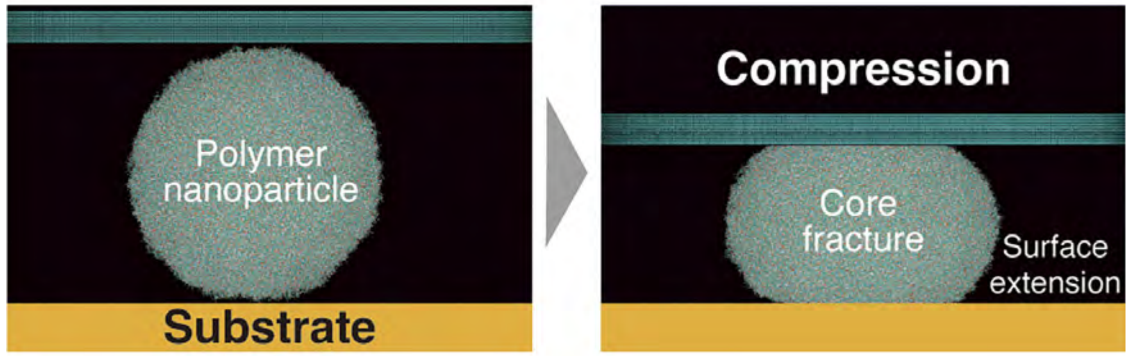
number of SO_3^- groups. We believe that insights like these can help make fuel cells lighter and improve their power generation efficiency.

— You're using the world-class supercomputer Fugaku for your simulations.

The more powerful the computer, the better. The polymer structures we study are highly irregular, with features such as puddle-like pools of water and winding channels. Because of this complexity, simulating only a small part cannot capture the full picture. As the number of atoms in the simulation increases, the use of a supercomputer becomes essential.

With a high-performance system like Fugaku, we can now run calculations on a scale never attempted before, opening up new possibilities in science. In fact, one could say that the rapid progress of MD simulation has been driven by the dramatic advances in computer performance.

高分子微粒子の破壊シミュレーション
Simulation of polymer nanoparticle fracture



※ Polymer nanoparticle ── 高分子微粒子
Substrate ── 基板

※ Compression ── 圧縮
Core fracture ── コア破壊
Surface extension ── 表面拡張

■ Environmentally friendly polymer nanoparticles

— What other research are you working on?

Another project is led by Professor Daisuke Suzuki of Okayama University, who is developing environmentally friendly polymer nanoparticles.

These nanoparticles range in size from a few dozen nanometers (a nanometer is one-billionth of a meter) to several micrometers (a micrometer is one-millionth of a meter). For example, the smooth, film-like coating on certain packaging paper is created by attaching polymer nanoparticles to its surface. Conventional polymer nanoparticles tended to be brittle and limited in use, but Professor Suzuki and his team discovered much more robust nanoparticles and have been expanding their applications.

In our collaboration, we are analyzing why these nanoparticles are so durable and exploring ways to design them with added functionality, such as the ability to break down after use. If successful, this research could lead to environmentally friendly materials that can be reused and recycled.

— What are the advantages of MD simulation?

MD simulation allows us to directly follow the motion of atoms and molecules and to reveal why a material has its specific functions. It cannot be applied to every substance, but when we can link a function to molecular structure, it brings a strong sense of achievement.

Another advantage is that we can model molecular structures that do not yet exist in reality and predict their properties. Experiments based on these predictions can then accelerate the pace of material development.

■ Continuing research in energy and environmental fields

— What kind of research do you plan to pursue in the future?

I plan to continue my work on fuel cells and polymer nanoparticles, as well as research in the broader fields of energy and the environment.

The global environment is undergoing major changes. For instance, summers now feel hotter than before, and everyday life is being affected in unexpected ways—for example, the price of Pacific saury (sanma) has soared due to poor catches. We cannot afford to ignore these issues. The quickest "solution" would be to simply turn off all the air conditioners, but of course that is unrealistic. A better approach, I believe, is to find ways to address environmental problems without forcing people to endure hardship.

With this in mind, I aim to contribute to building a sustainable future by promoting the use of renewable energy and developing functional materials with a low environmental impact.