

長期海外派遣報告書

工学系研究科 材料工学専攻 博士課程 2年

吉田・秋元研究室 松川滉

派遣期間: 2016/6/1~2016/8/15

概要

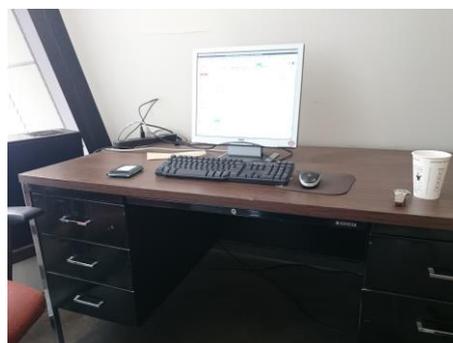
アメリカ合衆国ペンシルベニア州 University of Pittsburgh の Balazs 教授率いる研究グループにおいて長期海外派遣を行った。本報告書において、本派遣の背景、研究内容、滞在先での生活などについて報告する。

背景

Balazs 教授率いる研究グループは、ゲルを始めとするソフトマターを対象としたコンピュータシミュレーションを専門とする。私が所属する吉田・秋元研究室は化学振動反応を駆動力として体積振動を発現する自励振動ゲルを専門としており、Balazs 研とはかつて刺激応答性ゲル用に独自にモディファイされたゲル格子ばねモデル(gLSM)を用いた自励振動ゲルの駆動のシミュレーションに関連した共同研究の実績がある。今回、吉田教授を通して Balazs 教授に派遣受け入れのお願いをしたところ快諾していただき、本派遣が実現した。

研究内容

私にとって計算科学分野の研究が初めてだったということもあり、初心者でも取っ付き易い LAMMPS というソフトウェアを用いた散逸粒子動力学法(dissipative particle dynamics; DPD)シミュレーションを紹介していただき滞在期間中に取り組むことになった。始めの2~3週間は2元系の相分離シミュレーション用のスクリプト完成品を頂き、各種コマンドを LAMMPS のウェブサイトと照らし合わせながらスクリプトを理解する作業を行った。同時に、LAMMPS の改良および beads の初期位置のインプットファイルを作成するために必要となる C++言語の勉強を行った。



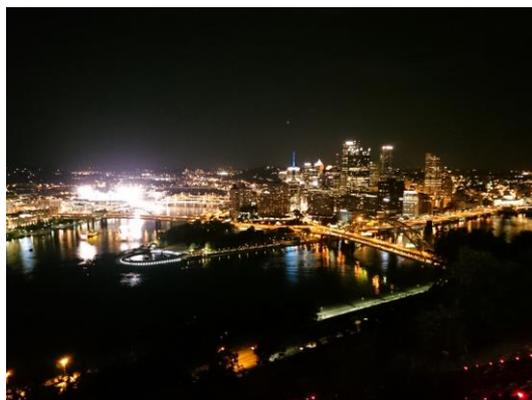
研究スペース

その後、ゲルの体積相転移挙動の DPD シミュレーションに言及した論文を頂き、論文中の数値などを参照しながら、自分で1から LAMMPS 用スクリプトを書き起こす作業を行った。一通り書いては実行してエラーを吐かせて修正するという作業をひたすら繰り返すのは忍耐を要した。最終的にたった1つの簡単なミスを見つけるのに2週間弱を要してしまい、これが終わった段階で滞在期間も残り1ヶ月程度となってしまっていた。

残りの期間は新規性のあるテーマとして、ゲル表面にスキン層が形成され溶媒拡散が抑制された条件下で発現することが知られている収縮パターンの形成を DPD シミュレーション上で再現することを試みた。特にスキン層の再現が非常にチャレンジングで、ポリマーとしての柔軟性を維持しながらポリマーネットワーク中の溶媒分子の外部への拡散は完全にシャットダウンするようになさなければならず、構成ビーズの各種パラメータの調整は困難であった。最終的には主に 2 種類の方法でこの問題に取り組み、ある程度望んだレベルのシミュレーション結果を得ることができた。

その他生活

ピッツバーグは合流する 2 本の川に挟まれた三角形の土地に栄えた街で、かつて鉄鋼産業が盛んだったことから”City of Steel”とも呼ばれる。その中でもピッツバーグ大学があるオークランド地区は、他にカーネギーメロン大学なども隣接する学生の街であり治安が良い。私が滞在した学生寮は大学のキャンパス内にあり、他に多数の留学生が滞在していた。周辺にレストランやファストフード店も非常に多く、昼食および夕食は基本的に大学周辺で済ませることが多かった。また、多くの交通機関や博物館などを学生は無料(もしくはディスカウント)で利用することができ、学生にとって非常に住みやすい街となっている。



ピッツバーグの夜景

ピッツバーグでは日本人同士の連絡網がしっかりしており、有志で更新している「ピッツバーグ便利帳」なるホームページで多くの生活に必要な情報を得ることができ、またメーリングリストも存在する。月に 1,2 度ほど BBQ が企画されるなど交流も盛んで、滞在初期に緊張からか体調を崩してしまっていた私にとって心の支えとなり、以後生活を楽しめるようになったきっかけとなった。

研究室には 10 時頃に向かい 19~20 時頃に帰るという生活をしてきた。薬品を使わずに 1 日中パソコンに向かって作業する研究スタイルにはあまり慣れることができず、行き詰まると吉田研での研究について考え始めてしまうということが頻繁にあった。週に 1 度グループミーティングがあり全員が 1 週間の研究進捗を口頭またはスライドで報告するが、ほぼ全員が投稿論文を執筆中であり、議論の活発さと研究サイクルの速さに驚いた。

謝辞

今回の私の長期海外派遣を快く受け入れて下さった Balazs 教授および Yashin 先生、ご自身の研究で忙しい中でシミュレーションの指導をしてくださったポスドクの皆様に感謝申

申し上げます。また、このような大変貴重な機会を持たせて下さった **MERIT** プログラムの先生方、吉田教授、秋元講師に心より御礼申し上げます。