

業績

## Development of Multi-scale Modeling of Polymer for Basic Science and Application



**Kurt Kremer**

Max Planck Institute for Polymer Research, Director (Ph.D.)

Kurt Kremer教授は1983年ケルン大学においてKurt Binder教授の下で博士号を取得した。その後、マインツ大学助教、ユーリッヒ原子力研究所研究員を経て、1995年に、マインツの高分子研究所のディレクターとなり、同研究所の理論・シミュレーション部門を率いて、ヨーロッパにおける高分子計算科学の中心的研究者として活躍してきた。とくに、粗視化分子動力学を用いた大規模シミュレーションにより、高分子科学の学理における発見を行うとともに、多階層的シミュレーションという新たな方法にチャレンジし、その材料科学への応用法を示した。

Kremer教授は、からみあった高分子系の大規模シミュレーションを実行することにより、当時想像上の産物であったレプテーション運動の実在性を示した。さらに絡み合い点間分子量を求める方法を考案し、レプテーション理論の定量性を示した。この一連の仕事において用いられたモデルはKremer-Grestモデルと呼ばれ、粗視化高分子の標準モデルとして現在でも広く用いられている。同氏はさらに高分子電解質についての大規模シミュレーションにより、教科書に書かれている平均場近似の見直しとイオン相関の重要性を示している。これらの仕事は高分子物理の根幹に影響を与えるものであり、2011年、同氏はGrest教授とともにアメリカ物理学会 Polymer Physics Prizeを受賞している。

さらに同氏は粗視化の考え方を発展させ、スケールの異なるモデルを連動させてシミュレーションを行う多階層的シミュレーション手法を提案し、これを用いて、分子吸着、小胞形成、電気伝導など、高分子の応用において重要な問題について、計算機シミュレーションが有用な知見をもたらすことを示した。

同氏は教育にも大きくかかわってきた。1996年より

マインツ大学教授を兼務しており、それ以外にも、ミネソタ大学招聘教授(1991年)カリフォルニア大学サンタバーバラ校招聘教授(1994年)、ニューヨーク大学招聘教授(2021年)も務めてきた。2012年には、UC Santa BarbaraのKavli理論物理学研究所において、ソフトマターの多階層的モデリングの物理に関するプログラムを組織し、3カ月間そのディレクターを務めた。

さらに、マックスプランクの計算機資源に関するアドヴァイザリー委員会の議長(2012~2020)、ドイツ科学基金(DFG)による共同研究プロジェクト“ソフトマターの多階層シミュレーション”の代表スポークスマン(2014~2022)などを務め、計算科学の進展に貢献してきた。

これらの貢献に対して、同氏にはドイツ物理学会よりWalter Schottky Prize(1992年)、アメリカ物理学会よりPolymer Physics Prize(2011年)、ハイデルベルグ大学より名誉教授の称号(2011年)などが与えられている。さらにドイツ科学アカデミーメンバー(2012年)、ヨーロッパ科学アカデミーメンバー(2019年)にも選出されている。

同氏は、日本の高分子研究者とも交流が深く、NEDOの「高機能材料設計プラットフォーム開発」プロジェクトにおいては、外国人アドバイザーとして参加した。また、プロジェクト終了後も、大学や企業から多くの研究者を受け入れてくれた。

このように、Kremer教授は、計算機を用いて、高分子の基礎的学理における重要な貢献をするとともに、異なった階層をつなぐ多階層的シミュレーション法を開発し、高分子科学における計算機シミュレーションの有用性を示した。同氏の高分子科学や高分子学会に対する貢献と寄与はきわめて大きく、高分子学会国際賞に値するものと認められた。