

平成18年度科学研究費補助金（基盤研究（S））研究状況報告書

◆ 記入に当たっては、「平成18年度科学研究費補助金（基盤研究（S））研究状況報告書記入要領」を参照してください。

ローマ字	MIYAMOTO AKIRA		②所属研究機関・部局・職		東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授	
①研究代表者氏名	宮本 明					
③研究課題名	和文	ハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータの開発				
	英文	Development of Tribochemical Reaction Simulator Based on Hybrid Quantum Chemical Molecular Dynamics Method				
④研究経費 18年度以降は内約額 金額単位：千円	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	総合計
	30,400	19,600	17,000	10,200	10,200	87,400
⑤研究組織（研究代表者及び研究分担者） *平成18年3月31日現在						
氏名	所属研究機関・部局・職	現在の専門	役割分担（研究実施計画に対する分担事項）			
宮本 明	東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授	分子材料設計学	研究全体の遂行と新規トライボロジー材料の理論設計 情報科学を活用した計算結果の統計的解析			
Carlos A. Del Carpio	東北大学・大学院工学研究科・助教授	情報科学				
久保 百司	東北大学・大学院工学研究科・助教授	量子分子動力学	高速化量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータの開発とその応用 ハイブリッド手法など量子分子動力学法の高 速化理論の開発とプログラム化 トライボケミカル反応シミュレータのための 3次元グラフィックプラットフォームの開発			
古山 通久	東北大学・大学院工学研究科・助手	計算化学				
坪井 秀行	東北大学・大学院工学研究科・助手	計算科学				
⑥当初の研究目的（交付申請書に記載した研究目的を簡潔に記入してください。）						
近年、環境・エネルギー対策、ダウンサイジング等の要請から微小領域でのトライボロジーの重要性が高まっている。特に最近では、化学反応を含むトライボケミカル反応の解明に対する要求が強くなってきた。しかし、世界的にもトライボケミカル反応を解明可能な理論計算プログラムは皆無である。そこで本研究では、研究代表者らが開発してきた分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータ TRIBOSIM と SCF-Tight-Binding 近似に基づく高速化量子分子動力学計算プログラム Colors を統合化し、トライボケミカル反応ダイナミクスを解明可能なトライボケミカル反応シミュレータ Tribo-Colors を世界に先駆けて開発する。さらに、開発プログラムを活用し、電子レベルでのトライボロジー材料・プロセスの理論設計を行う。具体的に、平成16～17年度は下記の研究計画に従って研究を遂行する：						
【平成16年度】						
（1）「化学反応」と「機械的摩擦」の両方を扱えるトライボケミカル反応シミュレータの開発						
研究代表者らが開発してきた分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータ TRIBOSIM と SCF-Tight-Binding 近似に基づく高速化量子分子動力学プログラム Colors を統合化し、トライボケミカル反応シミュレータ Tribo-Colors を開発する。						
（2）さらなる高速計算を可能とするハイブリッド量子分子動力学法の開発						
化学反応が起こる領域は高速化量子分子動力学法で、化学反応とは直接関係しない領域は古典分子動力学法で扱うハイブリッド量子分子動力学法プログラム Hybrid-Colors の開発を行う。						
（3）ハイブリッド量子分子動力学法を活用したトライボケミカル反応シミュレータの開発						
上述の Hybrid-Colors プログラムに TRIBOSIM を統合化し、ハイブリッド量子分子動力学法ベースのトライボケミカル反応シミュレータを開発する。またこれを活用し、潤滑剤のみならず添加剤も含む現実的な複雑系のトライボケミカル反応のシミュレーションを行う。						
【平成17年度】						
（1）さらなる高速計算を可能とする部分対角化法の開発とトライボケミカル反応シミュレータの高速化						
ハイブリッド量子分子動力学法によるトライボケミカル反応シミュレータに、研究代表者らがこれまでに理論構築してきた部分対角化法を組み込み、さらなる高速化を可能とする。						
（2）トライボケミカル反応シミュレータを活用した潤滑被膜の生成プロセスの反応機構解明						
これまでに開発したトライボケミカル反応シミュレータを活用し、フリクション低減用添加剤であるジアルキルジチオカルバミン酸モリブデン（Mo-DTC）に代表される様々な潤滑油添加剤のトライボケミカル反応を解明する。						

⑦これまでの研究経過（研究の進捗状況について、必要に応じて図表等を用いながら、具体的に記入してください。）

「化学反応」と「機械的摩擦」の両方を扱えるトライボケミカル反応シミュレータの開発とさらなる高速計算を可能とするハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータの開発

研究代表者らがこれまで独自に開発してきた分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータTRIBOSIMとSCF-Tight-Binding近似に基づく高速化量子分子動力学プログラムColorsを統合化することで、トライボケミカル反応ダイナミクスを解明可能なトライボケミカル反応シミュレータTribo-Colorsの開発に成功した。ただし、Tribo-Colorsでは数百原子系の化学反応ダイナミクスの解明が可能であるが、現実系のトライボケミカル反応を定量的に解明するためには、千原子以上の超大規模計算を

可能とする量子分子動力学法の開発が必要不可欠である。そこで、化学反応に直接関与しない部分は古典分子動力学法で扱い、化学反応が起こる部分はColorsプログラムで扱うハイブリッド量子分子動力学プログラムHybrid-Colorsの開発を行った。エンジンオイルのフリクション低減用添加剤であるジアルキルジチオカルバミン酸モリブデン（Mo-DTC）の Fe_2O_3 基板における化学反応ダイナミクスの解析に上記の

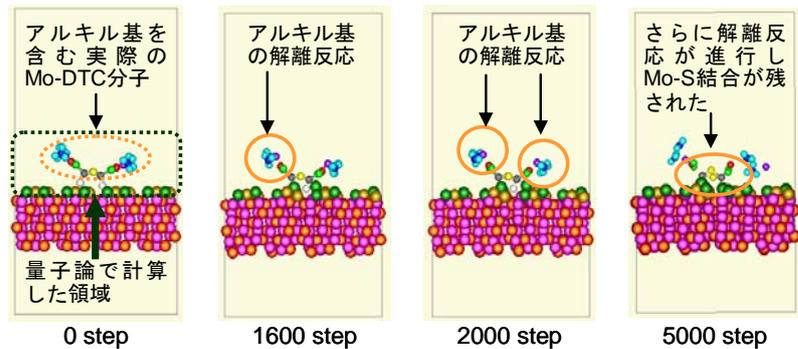


図 1. ハイブリッド量子分子動力学法による大規模 Fe_2O_3 基板上でのMo-DTC分子の化学反応ダイナミクス。

Hybrid-Colorsプログラムを適用したところ、Mo-DTC分子のアルキル基が解離し、最終的にMo-S結合が酸化鉄基板上に残るといった化学反応ダイナミクスが観察された（図 1）。このように、本基盤研究(S)で開発したHybrid-ColorsプログラムによりMo-DTC分子の化学反応ダイナミクスを世界的にもはじめて明らかにすることに成功した。

さらに、この Hybrid-Colors プログラムに分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータTRIBOSIM を統合化することで、ハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータを開発することにも成功した。本シミュレータをエンジンオイル用リン酸エステル系極圧添加剤であるリン酸トリメチルのトライボケミカル反応ダイナミクスの解明に適用した。計算モデルを図 2(a)に示す。鉄基板上でリン酸トリメチルを挟み込み、上側の鉄基板を速度 100 m/s で強制移動させることにより摩擦条件を実現した。図 2(b)には、リン酸トリメチルの酸素原子と固体基板である鉄との結合次数の時間変化について、摩擦条件下と摩擦無し条件下で比較した結果を示す。図 2(b)から、摩擦条件下の場合のみ、鉄とリン酸トリメチルの酸素原子との結合が形成され、摩擦しない条件下では結合が形成しないことがわかった。これは、化学反応を扱いつつ機械的摩擦の効果をシミュレートすることに成功したことを意味する。また摩擦条件下で形成した Fe-O 結合については、性質の異なる 2 種類の結合（共有結合とイオン結合）が存在することが明らかとなった。このように、量子論により化学反応ダイナミクスを追跡し、かつ機械的摩擦が化学反応に与える効果を明らかにすることにはじめて成功した。以上のように本基盤研究(S)は研究計画に従って着実に研究が進行している。

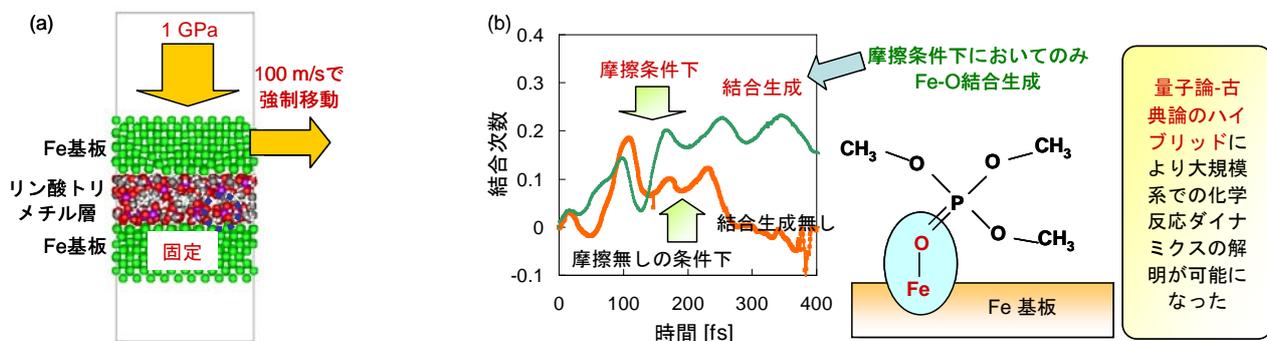


図 2. ハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータにより得られた、Fe基板上でのリン酸トリメチルのトライボケミカル反応ダイナミクス：(a) シミュレーションのモデル図、(b) 摩擦なし条件下、摩擦条件下でのリン酸トリメチルの酸素とFeとの結合次数の時間変化。

⑧特記事項 (これまでの研究において得られた、独創性・新規性を格段に発展させる結果あるいは可能性、新たな知見、学問的・学術的なインパクト等特記すべき事項があれば記入してください。)

学問的・学術的なインパクト

平成 17 年度奈良で開催されたトライボロジーの国際会議 Tribochem2005-Nara における研究代表者・宮本の発表において、研究代表者らが本プロジェクトで開発に成功した①TRIBOSIM と Colors プログラムを統合化したトライボケミカル反応ダイナミクスシミュレータ Tribo-Colors、②古典分子動力学法プログラムと Colors プログラムを統合化したハイブリッド量子分子動力学法プログラム Hybrid-Colors プログラム、および③Hybrid-Colors プログラムに TRIBOSIM シミュレータを統合化したハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータに関する講演を行った。この講演が、トライボロジー分野の実験研究では世界的に著名なリヨン工科大学・Martin 教授に大きなインパクトを与えたのを契機に、自動車エンジンオイルに磨耗防止剤として添加されているジアルキルジチオリン酸亜鉛 (ZDDP) のトライボケミカル反応に関して、リヨン工科大学の実験研究者グループとの国際共同研究がスタートした。

また、我が国で開催されているトライボロジー会議において本基盤研究(S)での研究成果を発表したところ、民間企業としてトライボロジー分野の研究および産業への展開ではリーディングカンパニーであるトヨタ自動車の研究者に大きなインパクトを与え、これを機にフリクション低減用添加剤として知られている Mo-DTC からの MoS₂ 潤滑被膜形成プロセス解明に関する共同研究がスタートした。このように本基盤研究(S)での成果は、学問的・学術的にも大きなインパクトを与えると共に産業界にも多大なる影響を与えた。

独創性・新規性を格段に発展させる結果あるいは可能性、新たな知見など

上述のトヨタ自動車との共同研究では、化学反応対応型古典分子動力学法プログラム NEW-RYUDO-CR の開発と MoS₂ 潤滑被膜形成プロセスへの応用に成功した。本プログラム開発は、基盤研究(S)の計画にはない想定外の成果である。本プログラムは、本基盤研究(S)で開発した Hybrid-Colors に基づくトライボケミカル反応シミュレータで得たトライボケミカル反応に関する「化学反応の起こりやすさ」を確率として表現することで、化学反応における結合の解離・形成過程を扱い化学反応ダイナミクスをシミュレートするという、全く新しいコンセプトに基づいている。本手法は、量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータよりも大規模で複雑な系について、より長時間のダイナミクスの計算が可能という大きな特徴がある。ここでは、図 3 に示す Mo-S 間での結合の解離・形成反応を確率論的に表現し、Mo-DTC 分子より生成した分子状 MoS₂ からの潤滑被膜形成ダイナミクスをシミュレートした。計算結果を図 4 に示す。初期段階でランダムなアモルファス構造となっていた MoS₂ 層が、トライボケミカル反応により周囲の MoS₂ と化学結合を形成し、Fe 基板表面上で MoS₂ が層状構造を形成する自己組織化プロセスを観察することにはじめて成功した。さらに、摩擦過程において Fe 基板表面に形成された MoS₂ 被膜の下層とその直下のアモルファス構造との間にすべりが生じている様子が観察された。このように、MoS₂ の層状構造が潤滑特性に重要な因子であることを本シミュレーションから示すことに成功した。以上、本基盤研究(S)での成果が契機となってスタートしたトヨタ自動車との共同研究において新規に開発した化学反応対応型古典分子動力学法プログラムの極めて高い有用性を示すことに成功した。上記成果は、平成 18 年 5 月のトライボロジー会議 2006 春にて発表予定である。またこの成果以外にも、上述のリヨン工科大学・Martin 教授らの実験研究グループとの国際共同研究である ZDDP のトライボケミカル反応解析についての成果を、平成 18 年度 4 月リヨンで開催された Frontiers in Boundary Lubricating Films 国際会議で発表した。

本研究課題に関する受賞

本研究課題におけるトライボケミカル反応シミュレータの開発に関して、共同研究者の久保百司が平成 18 年度文部科学大臣表彰(若手科学者賞)を受賞した。本研究課題におけるハイブリッド量子分子動力学法の開発に関して、共同研究者の古山通久が(財)みやぎ産業科学振興基金研究奨励賞を受賞した。

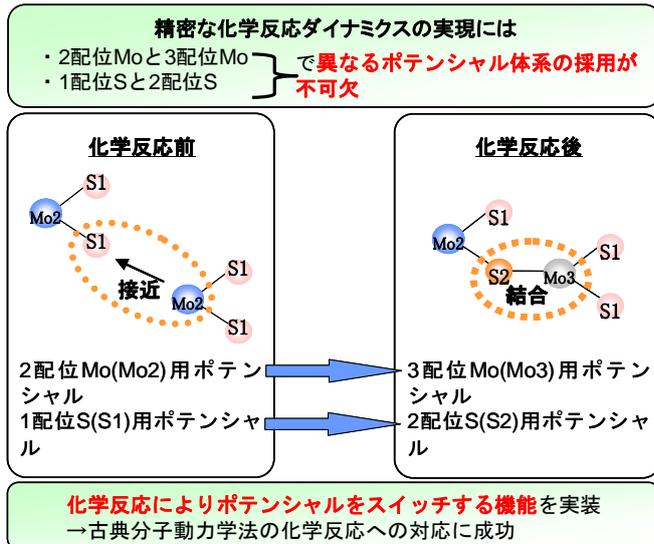


図 3. 開発した化学反応対応型古典分子動力学法プログラムで考慮した化学反応の模式図。

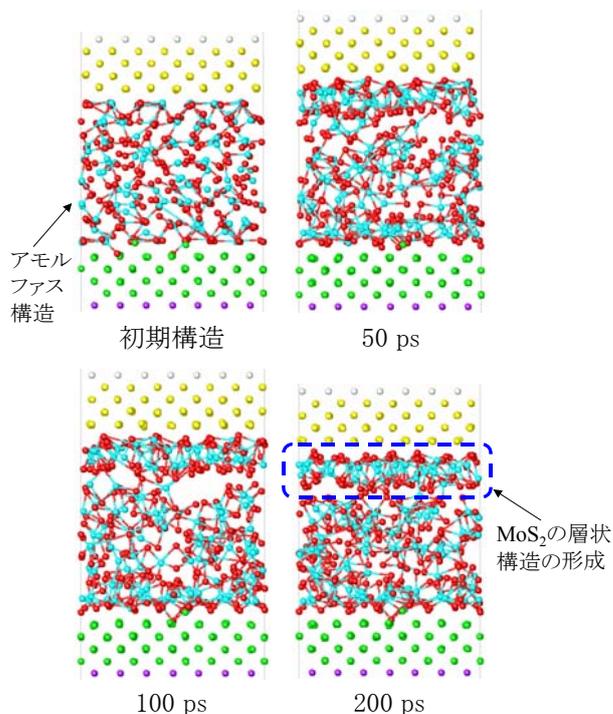


図 4. 分子状 MoS₂ から層状構造が形成されるトライボケミカル反応ダイナミクスシミュレーションのスナップショット。

⑨研究成果の発表状況 (この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文(掲載が確定しているものを含む。)の全著者名、論文名、学協会誌名、巻(号)、最初と最後のページ、発表年(西暦)、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。)

1. 学術論文など

- ① 大山高裕, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「計算化学によるトライボロジーへの新しいアプローチ」, トライボロジスト, 49 (2004) 4-8.
- (2) 久保百司, 古山通久, 宮本 明, 「コンビナトリアル計算化学」, 表面科学, 25 (2004) 690-698.
- ③ A. Rajendran, Y. Takahashi, M. Koyama, M. Kubo, and A. Miyamoto, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation of Mechano-Chemical Reactions during Chemical Mechanical Polishing Process of SiO₂ Surface by CeO₂ Particle", Appl. Surf. Sci., 244 (2005) 34-38.
- (4) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 宮本 明, 「半導体プロセスにおける化学反応の電子、原子レベル制御ー量子分子動力学に基づくマルチフィジックスシミュレーターの開発ー」, 応用物理, 74 (2005) 1052-1059.
- ⑤ 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 宮本 明, 「量子分子動力学法に基づく化学機械研磨プロセスシミュレータの開発」, 砥粒加工学会誌, 49 (2005) 366-369.
- (6) 宮本 明, 日本機械学会編, 「機械工学便覧デザイン編β4 機械要素・トライボロジー」, 丸善, (2005) 202-204.
- (7) 古山通久, 坪井秀行, 遠藤 明, 久保百司, デルカルピオ・カルロス, 宮本 明, 「計算化学が拓く新しい材料設計ー多分野での応用例と展望」, 未来材料, 6 (2006) 8-15.
- (8) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 宮本 明, 「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」, ケミカルエンジニアリング, 51 (2006) 42-50.
- (9) T. Masuda, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, M. Kubo, E. Broclawik, and A. Miyamoto, "Development of Hybrid Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Boron Implantation Process into Pre-Amorphized Silicon Substrate", Jpn. J. Appl. Phys., in press.
- (10) 古山通久, 坪井秀行, 遠藤 明, Carlos A. Del Carpio, 久保百司, 宮本 明, 「ものづくりのためのマルチスケール・マルチフィジックスコンビナトリアル計算化学」, マテリアルレポート 2006, 印刷中.

2. 国際会議での発表状況

- (1) A. Miyamoto, "Computational Methods for Nanotribology and Tribochemical Reactions", 3rd International Conference on "Computational Modeling and Simulation of Materials", Sicily, Italy, May 29-June 4, 2004. (招待講演)
- (2) M. Kubo, Y. Ito, K. Sasata, C. Jung, H. Kurokawa, M. Koyama, A. Imamura, and A. Miyamoto, "Development of Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Industrial Problems", 3rd International Conference on "Computational Modeling and Simulation of Materials", Sicily, Italy, May 29-June 4, 2004. (招待講演)
- (3) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, and A. Miyamoto, "Development of Multi-Physics Simulator Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Tokyo, Japan, November 3-6, 2004. (招待講演)
- (4) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, and A. Miyamoto, "Theoretical High-Throughput Screening for Materials and Catalysts Design: Quantum Chemical Molecular Dynamics and First-Principles Approach", The 19th CODATA International Conference; Satellite Symposium for Materials Informatics and Its Evolution, Berlin, Germany, November 7, 2004. (招待講演)
- (5) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, and A. Miyamoto, "Development of Multi-Physics Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulator and Its Application", Seminar on Quantum Chemistry, Berlin, Germany, November 9, 2004. (招待講演)
- (6) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, and A. Miyamoto, "Combinatorial Computational Chemistry Approach by Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", 2nd International Symposium on Combinatorial Computational Chemistry, Sendai, Japan, November 20, 2004. (招待講演)
- (7) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, and A. Miyamoto, "Development of Multi-Physics Quantum Chemical Molecular Dynamics Method for Combinatorial Computational Process and Material Design.", The Third Japan-US Workshop on Combinatorial Materials Science, Okinawa, Japan, December 8-10, 2004. (招待講演)

⑨研究成果の発表状況（続き）（この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文（掲載が確定しているものを含む。）の全著者名、論文名、学協会誌名、巻（号）、最初と最後のページ、発表年（西暦）、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。）

(8) J. Hayakawa, M. Nilindu, K Ito, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, A. Imamura, and A. Miyamoto, "Study on Tribochemical Reaction Dynamics of Phosphoric Ester under Friction Condition", P-10, Tribochemistry Nara 2005, Nara, Japan, May 26-27, 2005.

(9) A. Miyamoto, H. Tsuboi, M. Koyama, and M. Kubo, "Novel Computational Methods for Tribochemical Reaction Dynamics", Tribochemistry Nara 2005, Nara, Japan, May 26-27, 2005.

(10) M. Kubo, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, and A. Miyamoto, "Development of New Quantum Chemical Molecular Dynamics Method for Tribo-Chemical Reaction Dynamics and Its Application", Forefront of Tribology 2005, Kobe, Japan, May 28-29, 2005. (招待講演)

(11) M. Kubo, S. Nara, S. Masuda, H. Setogawa, K. Sugawara, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Suzuki, I. Nakagawa, T. Ohmori, and A. Miyamoto, "Hybrid Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to the Mechano-Chemical Reaction Dynamics of Mo-DTC under Shear Condition", E-51, International Tribology Conference 2005, Kobe, Japan, May 29-June 2, 2005. (トヨタ自動車との共同研究)

(12) A. Miyamoto, "Combinatorial Computational Chemistry for Industrial Innovations", The 4th Asia-Pacific Chemical Reaction Engineering Symposium, Gyeongju, Korea, June 12-15, 2005. (招待講演)

(13) A. Miyamoto, "Integrated Computational Chemistry Approach to Tribology and Tribochemistry", Frontiers in Boundary Lubricating Films, Lyon, France, April 9-14, 2006. (招待講演)

(14) T. Onodera, S. Nara, S. Takahashi, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, C. A. Del Carpio, M. Kubo, M. Clotilde, J.-M. Martin, and A. Miyamoto, "Computational Chemistry Study on the Tribochemical Reaction of ZDDP Lubricant Additives", Frontiers in Boundary Lubricating Films, Lyon, France, April 9-14, 2006. (リヨン工科大学・Martin教授との共同研究)

(15) M. Kubo, T. Onodera, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, C. A. Del Carpio, and A. Miyamoto, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics under Friction Condition", Frontiers in Boundary Lubricating Films, Lyon, France, April 9-14, 2006.

3. 国内学会等での発表状況

(1) 大山高裕, 古山通久, 久保百司, 今村 詮, 宮本 明, 「摩擦化学反応解明に関する計算化学的検討」, トライボロジー会議 2004 春, C32, 東京, 平成 16 年 5 月 12 日.

(2) 早川 潤, N. Muthubandara, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, 今村 詮, 宮本 明, 「高速化量子分子動力学法による摩擦化学反応ダイナミクスの解明」, 第 94 回触媒討論会, 4E20, 仙台, 平成 16 年 9 月 30 日.

(3) 久保百司, 奈良紗綾香, 増田幸子, 瀬戸川浩, 坪井秀行, 古山通久, 大森俊英, 中川郁郎, 鈴木 厚, 宮本 明, 「ハイブリッド高速化量子分子動力学法を活用したトライボケミカル反応ダイナミクスの解明」, トライボロジー会議 2004 秋, 2F12, 鳥取, 平成 16 年 11 月 11 日. (トヨタ自動車との共同研究)

(4) 早川 潤, N. Muthubandara, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, 今村 詮, 宮本 明, 「金属表面上での有機分子の摩擦化学反応ダイナミクス」, トライボロジー会議 2004 秋, 3C1, 鳥取, 平成 16 年 11 月 12 日.

(5) 久保百司, 古山通久, 宮本 明, 「量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発」, SORSTプロジェクト横断計算科学研究会, 大阪, 平成 16 年 12 月 15~16 日. (招待講演)

(6) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, 宮本 明, 「ハイブリッド高速化量子分子動力学法を用いたリン酸エステルの極圧下における挙動の解析」, 2005 年 (平成 17 年) 春季第 52 回応用物理学関係連合講演会, 31p-YA-4, 埼玉, 平成 17 年 3 月 31 日.

(7) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いた境界潤滑下におけるリン酸トリエステルの摩擦化学反応ダイナミクス」, ナノ学会第 3 回大会, 仙台, 平成 17 年 5 月 8 日.

(8) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「Hybrid量子分子動力学法を用いた摩擦ダイナミクスの検討」, 第 2 回東北大学バイオサイエンスシンポジウム, P-057, 仙台, 平成 17 年 5 月 16 日.

⑨研究成果の発表状況（続き）（この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文（掲載が確定しているものを含む。）の全著者名、論文名、学協会誌名、巻（号）、最初と最後のページ、発表年（西暦）、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。）

(9) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いた複雑潤滑環境下におけるトライボケミカルダイナミクス」, 日本コンピュータ化学会 2005 春季年会, 1008, 東京, 平成 17 年 5 月 19 日.

(10) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いたトライボケミカル反応ダイナミクスの解明」, 第 96 回触媒討論会, 3F29, 熊本, 平成 17 年 9 月 22 日.

(11) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いたリン酸エステル系極圧添加剤の摩擦化学反応の解析」, 平成 17 年度化学系学協会東北大会, 3A14, 仙台, 平成 17 年 9 月 25 日.

(12) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 宮本 明, 「マルチフィジックス量子分子動力学法によるトライボケミカル反応シミュレーション」, 第 2 回分子シミュレーションのトライボロジー応用に関する研究会, 平成 17 年 10 月 14 日, 東京海洋大学, 東京. (招待講演)

(13) 早川 潤, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いたリン酸エステル系潤滑油添加剤の摩擦反応ダイナミクスの解析」, 第 35 回石油・石油化学討論会盛岡大会, 2E16, 盛岡, 平成 17 年 10 月 28 日.

(14) 早川 潤, 小野寺拓, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, Del Carpio Carlos, 宮本 明, 「ハイブリッド量子分子動力学法を用いたリン酸エステル系極圧添加剤のトライボケミカルリアクションダイナミクスの解析」, トライボロジー会議 2005 秋, B2, 東京, 平成 17 年 11 月 16 日.

(15) 早川 潤, M. Clotilde, 伊藤耕祐, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, Del Carpio Carlos, J.-M. Martin, 足立幸志, 加藤康司, 宮本 明, 「Computational Approach to Tribochemical Reaction of ZDDP」, トライボロジー会議 2005 秋, B3, 東京, 平成 17 年 11 月 16 日. (リヨン工科大学・Martin 教授, 東北大・加藤康司教授との共同研究)

(16) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, Del Carpio Carlos, 宮本 明, 「マルチフィジックス量子分子動力学シミュレータの開発とそのトライボケミカル反応ダイナミクスへの応用」, トライボロジー会議 2005 秋, E21, 東京, 平成 17 年 11 月 17 日.

(17) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 宮本 明, 「コンビナトリアル計算化学手法による新材料設計・探索」, JST 新材料・探索ワークショップ, 東京, 平成 17 年 11 月 20 日. (招待講演)

(18) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 宮本 明, 「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」, 東北大学イノベーションフェア 2006, 東京, 平成 18 年度 2 月 7 日. (招待講演)

(19) 小野寺拓, 奈良紗綾香, 高橋周子, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, Carlos Del Carpio, M. Clotilde, J.-M. Martin, 宮本 明, 「計算化学手法を用いた潤滑油添加剤のトライボケミカル反応の解析」, 2006 年 (平成 18 年) 春季第 53 回応用物理学関係連合講演会, 22a-A-4, 東京, 平成 18 年 3 月 22 日. (リヨン工科大学・Martin 教授との共同研究)

(20) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明, 「マルチフィジックス量子分子動力学法の「ものづくり」へのアプローチ」, 2006 年 (平成 18 年) 春季第 53 回応用物理学関係連合講演会, 22a-A-4, 東京, 平成 18 年 3 月 22 日. (招待講演)

(21) 遠藤 明, 大沼宏彰, 呂 晨, A. Govindasamy, 坪井秀行, 古山通久, 久保百司, C. A. Del Carpio, 宮本 明, 「励起状態における化学反応ダイナミクスを可能とする量子分子動力学法の開発」, トライボロジー会議 2006 春, 平成 18 年 5 月 15~17 日 (発表予定)

(22) 久保百司, 奈良紗綾香, 増田幸子, 瀬戸川浩, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, C. A. Del Carpio, 西野典明, 鈴木 厚, 宮本 明, 「量子分子動力学法を活用した MoS₂ 潤滑被膜の化学反応ダイナミクス」, トライボロジー会議 2006 春, 平成 18 年 5 月 15~17 日 (発表予定) (トヨタ自動車との共同研究)

(23) 古山通久, 奈良紗綾香, 増田幸子, 瀬戸川浩, 三浦隆治, 坪井秀行, 久保百司, C. A. Del Carpio, 西野典明, 鈴木 厚, 宮本 明, 「化学反応対応型分子動力学法の開発と MoS₂ 潤滑被膜の形成プロセスへの応用」, トライボロジー会議 2006 春, 平成 18 年 5 月 15~17 日 (発表予定) (トヨタ自動車との共同研究)

(24) 小野寺拓, 奈良紗綾香, 高橋周子, 三浦隆治, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, M. Clotilde, J.-M. Martin, 宮本 明, 「境界潤滑下における ZDDP 潤滑油添加剤の耐磨耗膜形成ダイナミクスの解析」, トライボロジー会議 2006 春, 平成 18 年 5 月 15~17 日 (発表予定) (リヨン工科大学・Martin 教授との共同研究)

