

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)  
実施状況報告書(平成23年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

|                |  |
|----------------|--|
| 研究課題名          | 第一原理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と<br>低炭素化機械システムの設計 |
| 研究機関・<br>部局・職名 | 東北大学・大学院工学研究科・教授                                   |
| 氏名             | 久保百司   |

### 1. 当該年度の研究目的

平成22年度は、第一原理分子動力学法に基づき、非経験的に「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックス現象を解明することが可能なマルチフィジックスシミュレータを開発することに成功した。そこで、平成23年度は、同じく第一原理分子動力学法に基づき、非経験的に①「応力」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発、②「電位」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発、③「衝撃」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発を行う。さらに、マルチフィジックスシミュレータの高速化を実現するとともに、平成22年度に開発した「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの計算精度の検証と現象の解明を目的とした。また、一般市民を対象とした市民講座の開催を行うこととした。

### 2. 研究の実施状況

#### ①「応力」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発

基板に応力を加える機能を付加することで、「応力」と「化学反応」が複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象を解明可能なマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。

#### ②「電位」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発

「電位」は流体の構造に大きな影響を与えることから、「電位」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの第一ステップとして、「流体」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。

#### ③「衝撃」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発

分子を基板上に衝突させる機能を付加することで、「衝撃」と「化学反応」が複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象を解明可能なマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。

#### ④マルチフィジックスシミュレータの高速化

MPIを用いた並列化、水素の高速計算手法の開発により、シミュレータの高速化を実現した。

#### ⑤「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの計算精度の検証と現象の解明

固体潤滑剤として期待されるダイヤモンドライクカーボンの低摩擦機構の解明に成功するとともに、実験結果との詳細な比較を行うことで、開発シミュレータが高い計算精度を有していることを検証した。

#### ⑥一般市民を対象としたシンポジウムでの研究内容の発表と市民との科学・技術対話

平成24年3月18日(日)に仙台国際センターにて「世界をリードする東北大学機械系の若手研究者が目指す未来社会」とのタイトルで市民講座を主催するとともに、「シミュレーションで実現する環境にやさしい次世代自動車」の題目で最新の成果を紹介した。市民講座を収録したビデオをインターネットテレビCAT-V NET TVにアップロードし、国民に対して公開した([http://cat-vnet.tv/movie/tu\\_kikai/menu.html](http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html))。

3. 研究発表等

|                      |  |
|----------------------|--|
| <p>雑誌論文<br/>計5件</p>  | <p>(掲載済み一査読有り) 計3件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Kentaro Hayashi, Kotoe Tezuka, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, and Momoji Kubo, Tribochemical Reaction Dynamics Simulation of Hydrogen on a Diamond-Like Carbon Surface Based on Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics, <b>J. Phys. Chem. C</b>, 115 (2011) 22981–22986. ISSN 1932-7447, <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp207065n">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp207065n</a></li> <li>Seitaro Ito, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, Hideomi Koinuma, and Masatomo Sumiya, The Reason Why +c ZnO Surface is Less Stable than -c ZnO Surface: First-Principles Calculation, <b>J. Chem. Phys.</b>, 135 (2011) 241103. ISSN 0021-9606, <a href="http://jcp.aip.org/resource/1/jcpsa6/v135/i24/p241103_s1?bypassSSO=1">http://jcp.aip.org/resource/1/jcpsa6/v135/i24/p241103_s1?bypassSSO=1</a></li> <li>Tomomi Shimazaki and Momoji Kubo, Efficient Density Functional Theory Calculations with Weak Hydrogen Quantum Effect: Electron Density Analysis, <b>Chem. Phys. Lett.</b>, 525–526 (2012) 134–139. ISSN 0009-2614, <a href="http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261411015703">http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261411015703</a></li> </ol> <p>(掲載済み一査読無し) 計0件<br/>(未掲載) 計2件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Kentaro Hayashi, Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, and Momoji Kubo, Fate of Methanol Molecule Sandwiched between Hydrogen-Terminated Diamond-Like Carbon Films by Tribochemical Reactions: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study, <b>Faraday Discuss.</b>, in press. ISSN 0301-7249</li> <li>Shandan Bai, Tasuku Onodera, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, Friction Reduction Mechanism of Hydrogen- and Fluorine-Terminated Diamond-Like Carbon Films Investigated by Molecular Dynamics and Quantum Chemical Calculation, <b>J. Phys. Chem. C</b>, in press. ISSN 1932-7447</li> </ol> |
| <p>会議発表<br/>計66件</p> | <p>専門家向け 計66件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Momoji Kubo, “Multi-Physics Simulation by Quantum Chemical Molecular Dynamics“, International Conference on Computational &amp; Experimental Engineering and Sciences (<b>Invited Talk</b>), April 18–21, 2011, Nanjing, China.</li> <li>久保百司、「Tight-Binding 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と応用」、第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(基調講演)、2011年5月23日～24日、大阪大学コンベンションセンター、大阪</li> <li>林健太郎、加藤功次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、久保百司、「Tight-Binding 量子分子動力学法を用いた DLC の低摩擦発現機構の解明」、トライボロジー会議 2011 春、2011年5月23日～25日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>加藤功次、林健太郎、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、久保百司、「Tight-Binding 量子分子動力学法による窒化炭素膜の超低摩擦発現機構に関する理論的研究」、トライボロジー会議 2011 春、2011年5月23日～25日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>石川宗幸、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「CeO<sub>2</sub> 砥粒のガラス表面における化学機械研磨の計算科学シミュレーション」、トライボロジー会議 2011 春、2011年5月23日～25日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>久保百司、「マルチスケール計算科学シミュレーション技術の燃料電池への応用」、第111回燃料電池研究会セミナー(招待講演)、2011年5月25日、電気化学会、東京</li> <li>Momoji Kubo, Kentaro Hayashi, Kotoe Tezuka, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adach, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Tribochemical Reaction Dynamics of Diamond-like Carbon“, ECOTRIB 2011 – 3rd European Conference on Tribology, June 7–9, 2011, Vienna, Austria.</li> <li>久保百司、「第一原理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と低炭素化機械システムの設計」、2011年度第1回低炭素化研究会(招待講演)、2011年6月9日、東北大学多元物質科学研究所、仙台</li> <li>久保百司、「計算科学シミュレーション～計算科学で何が出来るか？ 基礎から環境・エネルギー分野への応用まで」、情報機構セミナー(招待講演)、2011年6月14日、きゅりあん、東京</li> <li>久保百司、「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と低炭素化機械システム</li> </ol>   |

|  |   |
|--|---|
|  | <p>への応用」、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会 &amp; 10 周年記念シンポジウム(招待講演)、2011 年 6 月 15 日～17 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>11. 桑原卓哉、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法による Si 薄膜太陽電池の結晶成長シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会 &amp; 10 周年記念シンポジウム、2011 年 6 月 15 日～17 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>12. 伊藤 寿、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法によるシリコン酸化膜の高選択性フルオロカーボンラジカルエッチングプロセス」、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会 &amp; 10 周年記念シンポジウム、2011 年 6 月 15 日～17 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>13. 坂之井遼太、許 競翔、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「固体酸化物形燃料電池の破壊特性に関する分子動力学シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会 &amp; 10 周年記念シンポジウム、2011 年 6 月 15 日～17 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>14. 久保百司、「Tight-Binding 量子分子動力学法による化学反応ダイナミクス理論設計」、近畿化学協会コンピュータ化学部会第 81 回例会(招待講演)、2011 年 6 月 21 日、大阪科学技術センター、大阪</p> <p>15. 久保百司、「特許とスクリーニングのための計算科学による推測法～電気デバイスの劣化解析の推測例をとおして」、And Teck セミナー(招待講演)、2011 年 7 月 29 日、川崎市産業振興会館、川崎</p> <p>16. 尾澤伸樹、林健太郎、樋口祐次、島崎智実、久保百司、「Tight-Binding 量子分子動力学法によるダイヤモンドカーボンの低摩擦機構の解明:摩擦下における水素生成反応」、水素量子アトムクス研究会、2011 年 8 月 22 日～23 日、東北大学、仙台</p> <p>17. 桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「Si 薄膜太陽電池の成膜プロセスに関する計算化学的アプローチ」、2011 年秋季第 72 回応用物理学会学術講演会、2011 年 8 月 29 日～9 月 4 日、山形大学小白川キャンパス、山形</p> <p>18. 伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「シリコン酸化膜 SiO<sub>2</sub> のフルオロカーボンラジカル CF<sub>2</sub> による高選択性エッチングへの量子分子動力学的アプローチ」、2011 年秋季第 72 回応用物理学会学術講演会、2011 年 8 月 29 日～9 月 4 日、山形大学小白川キャンパス、山形</p> <p>19. Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design of Mechanical System and Materials", 14 ACC - Cambodia Satellite Meeting (Invited Talk), September 3-5, 2011, Siem Reap, Cambodia.</p> <p>20. Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design of Chemical Reactions in Mechanical Engineering", 14th Asian Chemical Congress 2011 (Invited Talk), September 5-8, 2011, Bangkok, Thailand.</p> <p>21. Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Gaussian and Fourier Transform (GFT) Method and Fast ab-initio Calculation with Hydrogen Quantum Effect", 14th Asian Chemical Congress 2011 (Invited Talk), September 5-8, 2011, Bangkok, Thailand.</p> <p>22. 林健太郎、加藤功次、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、Jean-Michel Martin、久保百司、「ダイヤモンドカーボンが示すトライボケミカル反応ダイナミクスの量子分子動力学シミュレーション」、第 108 回触媒討論会、2011 年 9 月 20 日～9 月 22 日、北見工業大学、北海道</p> <p>23. 石川宗幸、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「ガラス表面研磨において CeO<sub>2</sub> ナノ砥粒が示す化学反応機構の計算科学シミュレーション」、第 108 回触媒討論会、2011 年 9 月 20 日～9 月 22 日、北見工業大学、北海道</p> <p>24. 坂之井遼太、許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「固体酸化物形燃料電池の破壊強度に関する分子動力学法と第一原理計算によるアプローチ」、第 108 回触媒討論会、2011 年 9 月 20 日～9 月 22 日、北見工業大学、北海道</p> <p>25. 桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「Si 薄膜太陽電池の結晶成長プロセスに関する量子分子動力学シミュレーション」、第 108 回触媒討論会、2011 年 9 月 20 日～9 月 22 日、北見工業大学、北海道</p> <p>26. 伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「フルオロカーボンラジカル CF<sub>2</sub> によるシリコン酸化膜 SiO<sub>2</sub> の高選択性エッチングへの量子分子動力学的アプローチ」、第 108 回触媒討論会、2011 年 9 月 20 日～9 月 22 日、北見工業大学、北海道</p> <p>27. 島崎智実、久保百司、「弱い水素量子効果のための高速化第一原理計算法」、第 5 回分子科学討論会 2011 札幌、2011 年 9 月 20 日～9 月 23 日、札幌コンベンションセンター、北海道</p> <p>28. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「化学反応を取り入れた高分子ガラスの破壊シミュレーション」、日本物理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 21 日～9 月 24 日、富山大学、富山</p> <p>29. Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics on Si Thin-Film Crystal Growth for Solar Cells", 2012 International Conference on</p> |
|--|---|

- Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), September 28–30, 2011, Aichi Industry & Labor Center (WINC AICHI), Nagoya, Japan.
30. Kentaro Hayashi, Koji Kato, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Maria Isabel de Barros Bouchet, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study for Tribo-Chemical Reaction Dynamics of DLC”, Tribochemistry Hagi 2011, October 26–28, 2011, Hotel Hagi-Komachi, Hagi, Japan. (研究者が企画した会議)
  31. Koji Kato, Kentaro Hayashi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, Momoji Kubo, “Theoretical Study on Super-Low Friction Mechanism of Carbon Nitride Coatings by Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”, Tribochemistry Hagi 2011, October 26–28, 2011, Hotel Hagi-Komachi, Hagi, Japan. (研究者が企画した会議)
  32. Muneyuki Ishikawa, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “A Study of Chemical Mechanical Polishing Process of Glass Surface Using CeO<sub>2</sub> Particle via Computational Simulations”, Tribochemistry Hagi 2011, October 26–28, 2011, Hotel Hagi-Komachi, Hagi, Japan. (研究者が企画した会議)
  33. Kentaro Hayashi, Koji Kato, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Maria Isabel de Barros Bouchet, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Low-Friction Mechanism and Tribo-Chemical Reaction Dynamics of DLC by Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation”, International Tribology Conference, Hiroshima 2011, October 30–November 3, 2011, International Conference Center Hiroshima, Hiroshima, Japan. (研究者が企画した会議)
  34. Koji Kato, Kentaro Hayashi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, Momoji Kubo, “Analysis of Super-Low Friction Mechanism of Carbon Nitride Coatings Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”, International Tribology Conference, Hiroshima 2011, October 30–November 3, 2011, International Conference Center Hiroshima, Hiroshima, Japan. (研究者が企画した会議)
  35. Muneyuki Ishikawa, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Analysis of Chemical Mechanical Polishing Mechanism of Glass Surface Using CeO<sub>2</sub> via Molecular Dynamics and ab-initio Calculation”, International Tribology Conference, Hiroshima 2011, October 30–November 3, 2011, International Conference Center Hiroshima, Hiroshima, Japan. (研究者が企画した会議)
  36. Momoji Kubo, “Atomistic Mechanism of Chemical Mechanical Polishing Process Clarified by Computational Simulations”, 2011 International Conference on Planarization/CMP Technology (**Invited Talk**), November 9–11, 2011, Seoul, Korea.
  37. Momoji Kubo, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Tribochemical Reaction Dynamics for Super-Low Friction System”, 2011 Materials Research Society Fall Meeting (**Invited Talk**), November 28–December 2, 2011, Boston, USA.
  38. Ryota Sakanoi, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Molecular Dynamics and First-Principles Approach to Fracture Properties of Solid Oxide Fuel Cell (SOFC)”, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 4–9, 2011, Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.
  39. Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Si Thin-Film Growth for Solar Cells during Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition”, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 4–9, 2011, Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.
  40. Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation of Highly Selective CF<sub>x</sub> Radical Etching of SiO<sub>2</sub>”, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 4–9, 2011, Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.
  41. Kentaro Hayashi, Koji Kato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Tribo-Chemical Reaction Dynamics of DLC in Alcoholic Environment by Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation”, International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 4–9, 2011, Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.
  42. Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “The Effects of Chemical Aging on the Crazing of Amorphous Polymers Studied by First-Principles and Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations”, International Symposium on Surface Science –Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation, December 11–15, 2011, Tower Hall Funabori, Tokyo, Japan.
  43. Jingxiang Xu, Ryota Sakanoi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “A Theoretical Study on the Sintering Behavior of Nickel-Ceramics in Solid Oxide Fuel Cells”, International Symposium on Surface Science –Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation, December 11–15, 2011, Tower Hall

|  |  |
|--|--|
|  | <p>Funabori, Tokyo, Japan.</p> <p>44. Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Chemical Reaction Dynamics in Mechanical System", Pure and Applied Chemistry International Conference 2012 (<b>Invited Talk</b>), January 11–13, 2012, Chiang Mai, Thailand.</p> <p>45. Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Tribochemical Reaction Dynamics of Diamond-Like Carbon", The 6th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization (<b>Invited Talk</b>), February 10–12, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>46. Ryota Sakanoi, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Molecular Dynamics and First-Principles Calculations on Fracture Properties of Gadolinium-Doped Ceria Electrolytes for Solid Oxide Fuel Cell Applications", The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization), February 10–12, 2012, Sendai and Matsushima, Japan.</p> <p>47. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Surface Reactions of SiH<sub>x</sub> Radicals during Silicon Chemical Vapor Deposition for Solar Cells", The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization), February 10–12, 2012, Sendai and Matsushima, Japan.</p> <p>48. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on CF<sub>x</sub> Radicals Etching Processes of Silicon-Dioxide", The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization), February 10–12, 2012, Sendai and Matsushima, Japan.</p> <p>49. Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "The Chemical Aging Process of Polyethylene Studied by First-Principles and Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations", The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization), February 10–12, 2012, Sendai and Matsushima, Japan.</p> <p>50. Jingxiang Xu, Ryota Sakanoi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Nickel Nanoparticles Sintering Processes on YSZ and ScSZ Surface via Molecular Dynamics Simulation", The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization), February 10–12, 2012, Sendai and Matsushima, Japan.</p> <p>51. Ryota Sakanoi, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Molecular Dynamics Simulation and First-Principles Calculation on Fracture Properties of Gadolinia Doped Ceria (GDC) Electrolytes for Solid Oxide Fuel Cell (SOFC)", International Workshop on Energy and Reliability 2012, February 22–26, 2012, Chosun University and Chonbuk National University, Korea.</p> <p>52. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Silicon Thin-Film Growth Simulation for Solar Cells Using Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", International Workshop on Energy and Reliability 2012, February 22–26, 2012, Chosun University and Chonbuk National University, Korea.</p> <p>53. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to Silicon-Dioxide Etching Processes by CF<sub>x</sub> Radicals", International Workshop on Energy and Reliability 2012, February 22–26, 2012, Chosun University and Chonbuk National University, Korea.</p> <p>54. Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Laurent Chazeau, Jean-Yves Cavallé, Tetsuo Shoji, Momoji Kubo, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation on Chemical Aging Process of Polymers under Gamma Irradiation for Nuclear Power Plant", International Workshop on Energy and Reliability 2012, February 22–26, 2012, Chosun University and Chonbuk National University, Korea.</p> <p>55. Momoji Kubo, Jean-Michel Martin, "Coupling Experimental Modeling and Computer Simulation – Friction of DLC under Hydrogen and Alcohol Atmospheres", Annual Workshop of ELYT Laboratory, March 12–14, 2012, Hyeres, France.</p> <p>56. Yuji Higuchi, Momoji Kubo, Laurent Chazeau, Tetsuo Shoji, Jean-Yves Cavallé, "Aging and Damage of Polymers for Coating and Insulation under Irradiations", Annual Workshop of ELYT Laboratory, March 12–14, 2012, Hyeres, France.</p> <p>57. Yuji Higuchi, Lucile Joly-Pottuz, Momoji Kubo, "Interactions between Grains – Better Understanding the Sintering Process and the Grain Evolution", Annual Workshop of ELYT Laboratory, March 12–14, 2012,</p> |
|--|--|

様式19 別紙1

|                                  |  |
|----------------------------------|--|
|                                  | <p>Hyerès, France.</p> <p>58. 佐藤誠一、林健太郎、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法による窒化炭素膜のトライボケミカル反応シミュレーション」、2012 年度精密工学会春季大会、2012 年 3 月 14 日～3 月 16 日、首都大学東京南大沢キャンパス、東京</p> <p>59. 河口健太郎、石川宗幸、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法による Cu 配線の化学機械研磨プロセスシミュレーション」、2012 年度精密工学会春季大会、2012 年 3 月 14 日～3 月 16 日、首都大学東京南大沢キャンパス、東京</p> <p>60. 石川宗幸、河口健太郎、中村美穂、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「計算科学シミュレーションを用いた CeO<sub>2</sub> 砥粒によるガラス研磨の化学反応機構の解析」、2012 年度精密工学会春季大会、2012 年 3 月 14 日～3 月 16 日、首都大学東京南大沢キャンパス、東京</p> <p>61. 柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法に基づく GaN の Cl ラジカルエッチングプロセスシミュレーション」、2012 年春季第 59 回応用物理学関係連合講演会、2012 年 3 月 15 日～3 月 18 日、早稲田大学早稲田キャンパス、東京</p> <p>62. 桑原卓哉、伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「Si 薄膜太陽電池プロセスの量子分子動力学法による解析」、2012 年春季第 59 回応用物理学関係連合講演会、2012 年 3 月 15 日～3 月 18 日、早稲田大学早稲田キャンパス、東京</p> <p>63. 伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学法に基づくシリコン酸化膜 SiO<sub>2</sub> の CF<sub>x</sub> ラジカルエッチングプロセスシミュレーション」、2012 年春季第 59 回応用物理学関係連合講演会、2012 年 3 月 15 日～3 月 18 日、早稲田大学早稲田キャンパス、東京</p> <p>64. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「化学劣化した半結晶高分子の破壊シミュレーション」、日本物理学会 2012 年年次大会、2012 年 3 月 24 日～3 月 27 日、関西学院大学、兵庫</p> <p>65. 小林 顕、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「PEFC 電解質における劣化プロセスの第一原理分子動力学シミュレーション」、電気化学会第 79 大会、2012 年 3 月 29 日～3 月 31 日、アクティティ浜松、静岡</p> <p>66. 坂之井遼太、許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「固体酸化物形燃料電池用ガドリニアドープセラミア電解質の破壊メカニズムに関する計算科学シミュレーション」、電気化学会第 79 大会、2012 年 3 月 29 日～3 月 31 日、アクティティ浜松、静岡</p> <p>一般向け 計0件</p> |
| <p>図書<br/>計5件</p>                | <p>(掲載済み) 計3件</p> <p>1. 久保百司、第一原理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と低炭素化機械システムの設計、化学工学、出版社:化学工学会、76 (2012) 193-196.</p> <p>2. 久保百司、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と低炭素化機械システムへの応用、Journal of Computer Chemistry, Japan、出版社:日本コンピュータ化学会、12 (2012) A3-A9</p> <p>3. 久保百司、第一原理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と低炭素化機械システムの設計、東北大学機械系同窓会ニュース、出版社:東北大学機械系同窓会、17 (2012) 2.</p> <p>(未掲載) 計2件</p> <p>1. 島崎智実、赤丸悟士、阿部孝之、久保百司、密度汎関数理論(DFT)に基づいた Ru/TiO<sub>2</sub> 触媒の反応解析に関する理論研究～CO<sub>2</sub> ベンド吸着構造～、富山大学水素同位体科学研究センター研究報告、出版社:富山大学水素同位体科学研究センター、in press.</p> <p>2. 尾澤伸樹、石川宗幸、中村美穂、久保百司、CeO<sub>2</sub> 砥粒による Wet 環境下での SiO<sub>2</sub> の研磨加工シミュレーション、表面科学、出版社:日本表面科学会、in press.</p>  |
| <p>産業財産権<br/>出願・取得状況<br/>計0件</p> | <p>(取得済み) 計0件</p> <p>(出願中) 計0件</p>   |
| <p>Webページ<br/>(URL)</p>          | <p>ウェブページの題名:CAT-Vnet 世界をリードする東北大学機械系の若手研究者が目指す未来社会<br/>ウェブサイトの名称:無料で楽しむインターネットテレビ CAT-V NET TV<br/>アクセス URL: <a href="http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html">http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html</a></p>  |

様式19 別紙1

|                         |  |
|-------------------------|--|
| <p>国民との科学・技術対話の実施状況</p> | <p>表題:市民講座「世界をリードする東北大学機械系の若手研究者が目指す未来社会」<br/>           実施日:平成 24 年 3 月 18 日(日) 場所:仙台国際センター<br/>           対象者:国民<br/>           参加者数:51 名<br/>           内容:研究者は「シミュレーションで実現する環境にやさしい次世代自動車」のタイトルで、本プロジェクトの最新の研究成果を紹介した。<br/>           市民講座の案内と詳細は、ホームページ <a href="http://www.mech.tohoku.ac.jp/news/detail.php?cid=1&amp;pid=393">http://www.mech.tohoku.ac.jp/news/detail.php?cid=1&amp;pid=393</a> に掲載した。市民講座を収録したビデオをインターネットテレビ CAT-V NET TV 上にアップロードし、国民に対して広く公開した(<a href="http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html">http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html</a>)。</p>   |
| <p>新聞・一般雑誌等掲載計0件</p>    | <p>該当なし。</p>   |
| <p>その他</p>              | <p><b>指導した学生の受賞</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 桑原卓哉、日本コンピュータ化学会特別奨学賞、「量子分子動力学法による Si 薄膜太陽電池の結晶成長シミュレーション」、日本コンピュータ化学会、2011 年 6 月 15 日</li> <li>2. 伊藤 寿、日本コンピュータ化学会奨学賞、「量子分子動力学法によるシリコン酸化膜の高選択性フルオロカーボンラジカルエッチングプロセス」、日本コンピュータ化学会、2011 年 6 月 15 日</li> <li>3. 坂之井遼太、日本コンピュータ化学会奨学賞、「固体酸化物形燃料電池の破壊特性に関する分子動力学シミュレーション」、日本コンピュータ化学会、2011 年 6 月 15 日</li> <li>4. Takuya Kuwahara, Best Poster Presenter Award, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Surface Reactions of SiH<sub>x</sub> Radicals during Silicon Chemical Vapor Deposition for Solar Cells”, The 6th General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization), Feb 10-12, 2012.</li> <li>5. 林健太郎、工学研究科長賞、「量子分子動力学法によるダイヤモンドライクカーボンの低摩擦メカニズムの解明と超低摩擦システムの理論設計」、2012 年 3 月 21 日</li> <li>6. 許 競翔、日本機械学会三浦賞、“Theoretical Study on Sintering Dynamics and Degradation Mechanism of Anode Catalysts in Solid Oxide Fuel Cell”, 2012 年 3 月 27 日</li> <li>7. 林健太郎、バイオロボティクス専攻長賞、「量子分子動力学法によるダイヤモンドライクカーボンの低摩擦メカニズムの解明と超低摩擦システムの理論設計」、2012 年 3 月 27 日</li> </ol> |

4. その他特記事項

該当なし。

## 実施状況報告書(平成23年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されず

## 1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

|      | ①交付決定額      | ②既受領額<br>(前年度迄の<br>累計) | ③当該年度受<br>領額 | ④(=①-②-<br>③)未受領額 | 既返還額(前<br>年度迄の累<br>計) |
|------|-------------|------------------------|--------------|-------------------|-----------------------|
| 直接経費 | 100,000,000 | 33,680,000             | 0            | 66,320,000        | 0                     |
| 間接経費 | 30,000,000  | 10,104,000             | 0            | 19,896,000        | 0                     |
| 合計   | 130,000,000 | 43,784,000             | 0            | 86,216,000        | 0                     |

## 2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

|      | ①前年度未執<br>行額 | ②当該年度受<br>領額 | ③当該年度受<br>取利息等額<br>(未収利息を除<br>く) | ④(=①+②+<br>③)当該年度<br>合計収入 | ⑤当該年度執<br>行額 | ⑥(=④-⑤)<br>当該年度未執<br>行額 | 当該年度返還<br>額 |
|------|--------------|--------------|----------------------------------|---------------------------|--------------|-------------------------|-------------|
| 直接経費 | 33,280,700   | 0            | 0                                | 33,280,700                | 32,019,617   | 1,261,083               | 0           |
| 間接経費 | 9,924,000    | 0            | 0                                | 9,924,000                 | 9,924,000    | 0                       | 0           |
| 合計   | 43,204,700   | 0            | 0                                | 43,204,700                | 41,943,617   | 1,261,083               | 0           |

## 3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

|         | 金額         | 備考                      |
|---------|------------|-------------------------|
| 物品費     | 15,517,192 | 並列計算用コンピュータサーバ等         |
| 旅費      | 4,963,116  | 研究成果発表旅費(MRS2011秋国際会議)等 |
| 謝金・人件費等 | 9,774,139  | 助教(研究専念教員)人件費等          |
| その他     | 1,765,170  | 市民講座開催費、投稿論文の英語校正料等     |
| 直接経費計   | 32,019,617 |                         |
| 間接経費計   | 9,924,000  |                         |
| 合計      | 41,943,617 |                         |

## 4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

| 物品名                | 仕様・型・性能<br>等                | 数量 | 単価<br>(単位:円) | 金額<br>(単位:円) | 納入<br>年月日 | 設置研究機関<br>名 |
|--------------------|-----------------------------|----|--------------|--------------|-----------|-------------|
| 並列計算用コン<br>ピュータサーバ | HPCテクノロジー<br>製DPPrT5500, 30 | 1  | 13,965,000   | 13,965,000   | 2011/8/19 | 東北大学        |
|                    |                             |    |              | 0            |           |             |
|                    |                             |    |              | 0            |           |             |