

課題番号	GR010
------	-------

**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25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 低炭素化機械システムの設計
研究機関・ 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 22～23 年度は、第一原理分子動力学法に基づく「摩擦と化学反応」、「応力と化学反応」、「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、平成 24 年度は第一原理分子動力学法に基づく「電位と化学反応」、「電磁波と化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。そこで平成 25 年度は①平成 24 年度に開発した 2 種類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、②トライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイの 4 課題におけるマルチフィジックス現象の解明、③量子論に基づく上記 4 課題における理論設計、④設計した機械システム、プロセス、材料の有効性の検証を目的とした。また、一般市民を対象とした市民講座を開催し、市民との対話を行うこととした。

2. 研究の実施状況

①平成 24 年度に開発した 2 種類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  
「電位と化学反応」に関しては Li イオン電池、「電磁波と化学反応」に関しては振動励起による水素生成に応用することで実験と同じ現象の再現を確認し、シミュレータが高い計算精度を有することを実証した。

②トライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイの 4 課題におけるマルチフィジックス現象の解明  
低摩擦材料として期待される SiC の摩擦反応、原子力発電で使用されるポリマーの劣化現象、燃料電池で使用されるナフィオンの劣化現象、ディスプレイにおける 2 次電子放出能などを解明した。

③量子論に基づくトライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイの理論設計  
トライボロジーに関しては、アルコールを活用した低摩擦システム、SiC を活用した水潤滑システム、原子力発電に関しては耐久性の高いケーブル用ポリマー構造、燃料電池に関しては耐久性の高い電解質膜構造と燃料電池の作動条件、プラズマディスプレイに関しては 2 次電子放出能を向上する保護膜構造などの理論設計に成功した。さらに、振動励起による水素合成に関しても最適な作動条件を設計した。

④設計した機械システム、プロセス、材料の有効性の検証と開発シミュレータへのフィードバック  
例えばトライボロジーに関してはフランスの Ecole Centrale de Lyon、原子力発電はフランスの INSA Lyon、水素合成は東北大学で有効性の実験検証が行われ、結果を開発シミュレータにフィードバックした。

⑤一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 25 年 8 月 25 日にせんだいメディアテークで市民講座を主催、最新の成果を紹介した。市民講座の様子をインターネットテレビ CAT-V で公開した([http://cat-vnet.tv/movie/tu\\_2013\\_summer/001\\_01.html](http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html))。

3. 研究発表等

<p>雑誌論文 計 7 件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計 7 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Jingxiang Xu, Ryota Sakanoi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, and Momoji Kubo, Molecular Dynamics Simulation of Ni Nanoparticles Sintering Process in Ni/YSZ Multi-Nanoparticle System, <b>J. Phys. Chem. C</b>, 117 (2013) 9663–9672. ISSN 1932–7447, <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp310920d">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp310920d</a></li> <li>2. Tasuku Onodera, Minseok Park, Kenichi Souma, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo, Transfer Film Formation Mechanism of Polytetrafluoroethylene: A Computational Chemistry Approach, <b>J. Phys. Chem. C</b>, 117 (2013) 10464–10472. ISSN 1932–7447, <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp400515j">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp400515j</a></li> <li>3. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo, Different Crystal Growth Mechanisms of Si(001)–(2x1):H during Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition of SiH<sub>3</sub> and SiH<sub>2</sub> Radicals: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, <b>J. Phys. Chem. C</b>, 117 (2013) 15602–15614. ISSN 1932–7447, <a href="http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4021504">http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4021504</a></li> <li>4. Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, and Momoji Kubo, Theoretical Study on the Effect of Three-Dimensional Porous Structure on the Sintering of Nickel Nanoparticles in the Ni/YSZ Anode, <b>ECS Trans.</b>, 57 (2013) 2459. ISSN 1938–6737, <a href="http://ecst.ecsdl.org/content/57/1/2459">http://ecst.ecsdl.org/content/57/1/2459</a></li> <li>5. Hiromitsu Takaba, Huifeng Zhong, Hideyuki Tsuboi, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, Application of Reaction Time Accelerating Molecular Dynamics to Modeling of Metallocene-Catalyzed Ethylene/1-butene Copolymerization, <b>J. Comput. Chem. Jpn.</b>, 12 (2013) 43–51. ISSN 1347–1767, <a href="http://dx.doi.org/10.2477/jccj.2012-0025">http://dx.doi.org/10.2477/jccj.2012-0025</a></li> <li>6. Satoshi Akamaru, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, and Takayuki Abe, Density Functional Theory Analysis of Methanation Reaction of CO<sub>2</sub> on Ru Nanoparticle Supported on TiO<sub>2</sub>(101), <b>Appl. Catal. A</b>, 470 (2014) 405–411. ISSN 0926–860X, <a href="http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2013.11.016">http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2013.11.016</a></li> <li>7. Ryota Sakanoi, Tomomi Shimazaki, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, and Momoji Kubo, Different Behavior of Young’s Modulus and Fracture Strength of CeO<sub>2</sub>: Density Functional Theory Calculations, <b>J. Chem. Phys.</b>, 140, (2014) 121102. ISSN 0021–9606, <a href="http://dx.doi.org/10.1063/1.4869515">http://dx.doi.org/10.1063/1.4869515</a></li> </ol> <p>(掲載済み一査読無し) 計 0 件</p> <p>(未掲載) 計 0 件</p>
<p>会議発表 計 111 件</p>	<p>専門家向け 計 111 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 久保百司、「計算科学シミュレーションによる化学反応の制御と理論設計」、第 57 回中国四国産学連携化学フォーラム(招待講演)、2013 年 4 月 12 日、広島大学東広島キャンパス、広島</li> <li>2. Momoji Kubo, “First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reactions of Diamond-Like Carbon and Its Related Materials”, The Fourth Advanced Forum on Tribology 2013, Beijing(招待講演), April 13–15, 2013, Beijing, China.</li> <li>3. 久保百司、「計算科学シミュレーションを活用したダイヤモンドライクカーボンにおけるトライボケミカル反応ダイナミクスと低摩擦機構の解明」、第 37 回ドライコーティング研究会(招待講演)、2013 年 4 月 26 日、尼崎リサーチ・インキュベーション・センター、尼崎</li> <li>4. 張 琪、刀 東風、白 珊丹、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「ナノスクラッチされたグラフェンレイヤーの原子構造と機械特性の計算科学に基づく解明」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>5. 白 珊丹、小林康彦、佐藤誠一、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「化学修飾した DLC 膜におけるトライボケミカル反応プロセスの計算科学による解明」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>6. 周 康、尾澤伸樹、石川岳志、樋口祐次、久保百司、「計算科学手法に基づいたシリカ砥粒によるサファイア表面の化学機械研磨プロセスの解析」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> <li>7. 河口健太郎、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「化学機械研磨によるシリコンウェハの平滑化メカニズムの量子分子動力学法による解析」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</li> </ol>

8. 佐藤誠一、小林康彦、白 珊丹、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「計算科学シミュレーションによる窒化炭素膜の窒素原子が摩擦特性に及ぼす影響」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京
9. 小林康彦、佐藤誠一、白 珊丹、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「量子分子動力学法を用いた水潤滑による炭化ケイ素の低摩擦化に関する研究」、トライボロジー会議 2013 春、2013 年 5 月 20 日～22 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京
10. 小林康彦、佐藤誠一、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「量子分子動力学法に基づく炭化ケイ素膜の水潤滑シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2013 年春季年会、2013 年 5 月 30 日～31 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京
11. 中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「リチウムイオン電池の劣化プロセスに関する量子分子動力学シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2013 年春季年会、2013 年 5 月 30 日～31 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京
12. 千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「エチレングリコールを用いた固体アルカリ形燃料電池における酸化触媒の反応特性に関する第一原理計算」、日本コンピュータ化学会 2013 年春季年会、2013 年 5 月 30 日～31 日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京
13. 久保百司、「セリア CMP の計算科学シミュレーションと代替砥粒の提案」、「プラナリゼーション CMP とその応用技術専門委員会」第 126 回研究会(招待講演)、2013 年 6 月 21 日、名古屋大学 ES 総合館、名古屋
14. 久保百司、「計算科学による研磨メカニズム解明と材料設計」、第 1 回「先端表面創成工学の新展開」研究会(招待講演)、2013 年 7 月 29 日、キャンパス・イノベーションセンター東京、東京
15. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Etching Processes of Silicon-Dioxide and Theoretical Design of the Etching Processes", The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, August 4-9, 2013, Hawaii, USA.
16. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Atomistic Growth Mechanism of Thin-Film Silicon for Solar Cells: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations", The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, August 4-9, 2013, Hawaii, USA.
17. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Chemical Degradation Process in Perfluorosulfonic Acid Membranes", The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, August 4-9, 2013, Hawaii, USA.
18. Kazuyuki Yanagiya, Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Chemical Reaction Dynamics during the GaN Etching Processes", The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, August 4-9, 2013, Hawaii, USA.
19. Momoji Kubo, "Tribological Reaction Dynamics of Diamond-Like Carbon and Its Related Materials by First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations", Tribo-Lyon 2013(招待講演), September 4-6, 2013, Lyon, France.
20. Nobuki Ozawa, Miho Nakamura, Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, "First-Principles Calculation on CMP Process of Glass Surface by CeO<sub>2</sub> Particle and Design of Alternative Abrasive Grain", Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.
21. Qi Zhang, Dongfeng Diao, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Tribological Properties and Mechanism of Graphene by Computational Study", Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.
22. Shandan Bai, Qi Zhang, Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "First-Principles Calculation on the Structure Transition of Diamond to Graphene in Si-Doped DLC", Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.
23. Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Chemical Mechanical Polishing Processes for Silicon Wafer by SiO<sub>2</sub> Abrasive Grain", Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.
24. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Influence of Nitrogen on Friction Properties of CN<sub>x</sub> Coatings Based on First-Principles Molecular Dynamics and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods", Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.
25. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理計算と粗視化分子動力学法によるポリエチレンの化学劣化が耐久性に与える影響」、日本機械学会 2013 年度年次大会、2013 年 9 月 8 日～11 日、岡山大学津島キャンパス、岡山

26. 許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「計算科学シミュレーションによるNi/YSZ 電極の劣化プロセスの解明」、日本機械学会 2013 年度年次大会、2013 年 9 月 8 日～11 日、岡山大学津島キャンパス、岡山
27. 小林 颯、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「フッ素系高分子電解質における側鎖分解プロセスの第一原理分子動力学シミュレーション」、日本機械学会 2013 年度年次大会、2013 年 9 月 8 日～11 日、岡山大学津島キャンパス、岡山
28. 中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法に基づきリチウムイオン電池の劣化プロセスシミュレーション」、日本機械学会 2013 年度年次大会、2013 年 9 月 8 日～11 日、岡山大学津島キャンパス、岡山
29. 千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「エチレングリコールを用いたアルカリ形燃料電池における反応活性の第一原理計算による検討」、日本機械学会 2013 年度年次大会、2013 年 9 月 8 日～11 日、岡山大学津島キャンパス、岡山
30. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Atomistic Mechanisms of SiO<sub>2</sub> Etching Process by Fluorocarbon Radicals", 246th American Chemical Society National Meeting & Exposition, September 8-12, 2013, Indiana, USA.
31. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Film Growth Mechanisms of Microcrystalline Silicon Solar Cells", 246th American Chemical Society National Meeting & Exposition, September 8-12, 2013, Indiana, USA.
32. Nobuki Ozawa, Miho Nakamura, Kentaro Kawaguchi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, "Computational Study on Chemical Mechanical Polishing Properties of Perovskite Oxide Abrasive Grain", The Fifth World Tribology Congress, September 8-13, 2013, Torino, Italy.
33. Qi Zhang, Dongfeng Diao, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Nanoscratching of Multi-Layer Graphene by Molecular Dynamics Simulations", The Fifth World Tribology Congress, September 8-13, 2013, Torino, Italy.
34. Shandan Bai, Seiichiro Sato, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Ultralow Friction of H and F-terminated DLC Films under UHV: A Computational Study", The Fifth World Tribology Congress, September 8-13, 2013, Torino, Italy.
35. Kentaro Kawaguchi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Mechano-Chemical Reactions during Chemical Mechanical Polishing Processes for Semiconductor Devices", The Fifth World Tribology Congress, September 8-13, 2013, Torino, Italy.
36. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Studies for Low Friction Mechanism of Carbon Nitride Coatings", The Fifth World Tribology Congress, September 8-13, 2013, Torino, Italy.
37. Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Fracture Process of Semicrystalline Polymers by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation and Degradation of Polyethylene by First-Principles Molecular Dynamics Simulation", International Soft Matter Conference 2013, September 15-19, 2013, Rome, Italy.
38. 尾澤伸樹、周 康、會澤豪大、樋口祐次、久保百司、「シリカ砥粒を用いた $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 基板の化学機械研磨メカニズムの第一原理計算による検討」、2013 年第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、2013 年 9 月 16 日～20 日、同志社大学京田辺キャンパス、京田辺
39. 伊藤寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学法に基づくフルオロカーボンラジカルによる SiO<sub>2</sub> エッチングプロセスの解明」、2013 年第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、2013 年 9 月 16 日～20 日、同志社大学京田辺キャンパス、京田辺
40. 桑原卓哉、伊藤寿、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学シミュレーションによる薄膜シリコン太陽電池の結晶成長機構に関する研究」、2013 年第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、2013 年 9 月 16 日～20 日、同志社大学京田辺キャンパス、京田辺
41. 柳谷一行、伊藤寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学シミュレーションによる GaN プラズマエッチングプロセスについての検討」、2013 年第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、2013 年 9 月 16 日～20 日、同志社大学京田辺キャンパス、京田辺
42. 許 競翔、齋藤慎一郎、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「分子動力学法によるニッケル-ジルコニア系サーメット材料におけるドーパントがシタリングに及ぼす効果の検討」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手形キャンパス、秋田
43. 小林 颯、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「ラジカル種による高分子電解質の化学的劣化プロセスの第一原理分子動力学シミュレーション」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手

	<p>形キャンパス、秋田</p> <p>44. 茅 暁馨、許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「人工骨材料の機械特性に関する計算科学シミュレーション」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手形キャンパス、秋田</p> <p>45. 小林康彦、佐藤誠一、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「水潤滑による炭化ケイ素膜のトラボケミカル反応ダイナミクスに関する量子分子動力学シミュレーション」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手形キャンパス、秋田</p> <p>46. 千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理計算に基づくアルカリ形燃料電池における遷移金属表面上のエチレングリコール酸化反応シミュレーション」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手形キャンパス、秋田</p> <p>47. 中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法に基づくリチウムイオン電池正極の化学反応による劣化プロセスの解析」、第 112 回触媒討論会、2013 年 9 月 18 日～20 日、秋田大学手形キャンパス、秋田</p> <p>48. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「フィラーが高分子の劣化と耐久性に与える影響」、日本物理学会 2013 年秋季大会、2013 年 9 月 25 日～28 日、徳島大学常三島キャンパス、徳島</p> <p>49. Shandan Bai, Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Computational Study on the Low Friction Mechanism of Si Doped DLC Films", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>50. Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, Momoji Kubo, "A Multi-Nanoparticle Molecular Dynamics Simulation of the Sintering Process in Porous Material", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>51. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "A Theoretical Study on Plasma Etching Processes of SiO<sub>2</sub> by Fluorocarbon Radicals: Tight-binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>52. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Chemical Vapor Deposition Mechanism of Thin-Film Silicon Solar Cells: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>53. Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Momoji Kubo, "Water Lubrication Mechanism of Silicon Carbide Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>54. Shigeki Chieda, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles Study of Ethylene Glycol Oxidation on Transition Metal Surface for Alkaline Fuel Cell", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>55. Kosuke Nakamura, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Degradation Process of Lithium-Ion Battery Cathode", The International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan, September 28-30, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>56. 久保百司、「第一原理分子動力学法と Tight-Binding 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トラボケミカル反応ダイナミクス」、第 2 回表面物性研究会(招待講演)、2013 年 10 月 3 日、大阪市立工業研究所、大阪</p> <p>57. Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, Momoji Kubo, "Theoretical Study on the Effect of Three-Dimensional Porous Structure on the Sintering of Nickel Nanoparticles in the Ni/YSZ Anode", 13th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells, October 6-11, 2013, Naha, Japan.</p> <p>58. Momoji Kubo, "Development of Tribo-Chemical Reaction Simulators Based on First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods for Design of Low Friction Materials", GRENE &amp; TIMT Joint International Symposium on Tribology(招待講演), October 7, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>59. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理計算と粗視化シミュレーションによるフィラーの入った高分子の劣化と耐久性」、日本コンピュータ化学会 2013 年秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>60. 許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「分子動力学法を用いたシタリングが誘起する Ni/YSZ アノードの劣化解析」、日本コンピュータ化学会 2013 年秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都</p>
--	--

	<p>キャンパス、福岡</p> <p>61. 伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学シミュレーションを用いた <math>CF_x</math> ラジカルによる <math>SiO_2</math> エッチングメカニズムの解明」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>62. 桑原卓哉、伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法による薄膜 Si 太陽電池の CVD 成長シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>63. 柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法を用いた GaN 基板のエッチングにおける Cl ラジカルとの反応機構の検討」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>64. 千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「エチレングリコールを用いた固体アルカリ形燃料電池における酸化触媒の反応特性に関する第一原理計算」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>65. 中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法を用いたリチウムイオン電池正極/電解液界面における化学反応の解析」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>66. 齋藤慎一郎、坂之井遼太、樋口祐次、尾澤伸樹、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及び第一原理シミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2013 秋季年会、2013 年 10 月 18 日～19 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>67. 小林 顕、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理分子動力学法によるフッ素系高分子電解質の分解メカニズムの解明」、日本機械学会 熱工学コンファレンス 2013、2013 年 10 月 19 日～20 日、弘前大学文京キャンパス、弘前</p> <p>68. 白 珊丹、小林康彦、佐藤誠一、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「Si ドープダイヤモンドライクカーボンの構造変化に関する理論的研究」、トライボロジー会議2013秋、2013年10月23日～25日、アクロス福岡、福岡</p> <p>69. 河口健太郎、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子化学計算手法を活用した窒化ガリウム基板の化学機械研磨シミュレーション」、トライボロジー会議 2013 秋、2013 年 10 月 23 日～25 日、アクロス福岡、福岡</p> <p>70. 佐藤誠一、小林康彦、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「計算科学手法による窒化炭素膜界面の低摩擦機構に関する研究」、トライボロジー会議2013秋、2013年10月23日～25日、アクロス福岡、福岡</p> <p>71. 小林康彦、佐藤誠一、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「第一原理分子動力学法及び量子分子動力学法による炭化ケイ素の水潤滑機構に関する研究」、トライボロジー会議 2013 秋、2013 年 10 月 23 日～25 日、アクロス福岡、福岡</p> <p>72. 久保百司、「第一原理分子動力学法と Tight-Binding 量子分子動力学法によ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」、日本機械学会第 26 回計算力学講演会、2013 年 11 月 2 日～4 日、佐賀大学大学院工学研究科、佐賀</p> <p>73. Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Super-Low Friction Mechanism of DLC and Its Related Materials", 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures in conjunction with 21st International Colloquium on Scanning Probe Microscopy(招待講演), November 3-7, 2013, Tsukuba, Japan.</p> <p>74. 尾澤伸樹、周 康、會澤豪大、樋口祐次、久保百司、「シリカ砥粒による <math>\alpha-Al_2O_3</math> 基板の化学機械研磨プロセスの計算科学手法を用いた解析」、第 5 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2013 年 11 月 5 日～7 日、仙台国際センター、仙台</p> <p>75. 白 珊丹、小林康彦、佐藤誠一、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「計算科学シミュレーションによる Si ドープダイヤモンドライクカーボンの構造変化のメカニズム解明」、第 5 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2013 年 11 月 5 日～7 日、仙台国際センター、仙台</p> <p>76. 河口健太郎、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法と第一原理計算による窒化ガリウムの化学機械研磨プロセスの理論的解明」、第 5 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2013 年 11 月 5 日～7 日、仙台国際センター、仙台</p> <p>77. 佐藤誠一、小林康彦、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「Tight-Binding 量子分子動力学法と第一原理分子動力学法による窒化炭素膜界面の低摩擦機構に関する研究」、第 5 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2013 年 11 月 5 日～7 日、仙台国際センター、仙台</p> <p>78. 小林康彦、佐藤誠一、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司、「計算科学手法を用いた炭化ケイ素の水潤滑における表面特性変化の解明」、第 5 回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、2013 年 11 月 5 日～7 日、仙台国際センター、仙台</p> <p>79. Nobuki Ozawa, Miho Nakamura, Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, "First-Principles Study on</p>
--	---

	<p>CMP Process of Glass Surface by Perovskite Oxide Abrasive Grain”, The 8th General Meeting of ACCMS-VO , November 7-9, 2013, Sendai &amp; Matsushima, Japan.</p> <p>80. Shandan Bai, Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Computational Simulation on Structure Change of Diamond-Like Carbon by Si Doping”, The 8th General Meeting of ACCMS-VO , November 7-9, 2013 , Sendai &amp; Matsushima, Japan.</p> <p>81. Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Momoji Kubo, “Quantum Chemical Study on Chemical Reactions at Silicon Carbide Surface under Water Lubrication”, The 8th General Meeting of ACCMS-VO , November 7-9, 2013, Sendai &amp; Matsushima, Japan.</p> <p>82. Kosuke Nakamura, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Chemical Reaction Study between Cathode and Organic Solvent in Lithium Ion Battery by Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”, The 8th General Meeting of ACCMS-VO , November 7-9, 2013, Sendai &amp; Matsushima, Japan.</p> <p>83. 久保百司、「計算科学シミュレーション技術の基礎と「触媒」への応用」、情報機構セミナー(招待講演)、2013年11月14日、中小企業振興公社、東京</p> <p>84. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, “Atomistic Etching Mechanisms of SiO<sub>2</sub> Surface by Fluorocarbon Radicals: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation”, 2013 MRS Fall Meeting &amp; Exhibit, December 1-6, 2013, Massachusetts, USA.</p> <p>85. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Chemical Reaction Dynamics of Silicon Chemical Vapor Deposition for Thin-Film Solar Cells: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations”, 2013 MRS Fall Meeting &amp; Exhibit, December 1-6, 2013, Massachusetts, USA.</p> <p>86. Shandan Bai, Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Generation of Graphene Structure in Diamond Surface by Si-Doping: First-Principles Calculations”, The 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 8-13, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>87. Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Momoji Kubo, “Chemical Reactions of Silicon Carbide Surface Sliding in Water: First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study”, The 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 8-13, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>88. Shinichiro Saito, Ryota Sakanoi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, Momoji Kubo, “Fracture Properties of Gadolinia Doped Ceria Electrolytes for Solid Oxide Fuel Cell”, The 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 8-13, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>89. Shigeki Chieda, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “First-Principles Study of Ethylene Glycol Oxidation on Transition Metal Surface for Alkaline Fuel Cell”, The 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 8-13, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>90. Kosuke Nakamura , Yuji Higuchi , Nobuki Ozawa , Momoji Kubo, “Chemical Reaction Analysis in Lithium-Ion Battery Cathode/Electrolyte Interface by Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”, The 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 8-13, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>91. 久保百司、「低炭素社会実現のためのマルチフィジックス計算科学シミュレーション」、第2回グリーンマテリアル研究会(招待講演)、2014年1月8日、松島一の坊ホテル、松島</p> <p>92. 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」、第5回ナノテク・低炭素化材料技術シンポジウム(招待講演)、2014年1月22日、東北大学さくらホール、仙台</p> <p>93. Momoji Kubo, “First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design of Tribochemical Reaction”, HYDROGENIUS &amp; I<sup>2</sup>CNER Joint Research Symposium(招待講演), January 31, 2014, Fukuoka, Japan.</p> <p>94. Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Effect of the 3D Porous Structure on the Sintering of Ni Nanoparticles in the Ni/YSZ Anode: A Molecular Dynamics Simulation Study”, TMS 2014 the 143rd Annual Meeting &amp; Exhibition, February 16-20, 2014, California, USA.</p> <p>95. Lucile Joly-Pottuz, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, “Contribution of Simulation Works to a Better Understanding of Ceramic Materials”, ELYT Workshop 2014, February 19-21, 2014, Frejus, France.</p> <p>96. Yuji Higuchi, Momoji Kubo, Laurent Chazeau, Jean-Yves Cavaille, Tetsuo Shoji, “Polymer Degradation under Gamma Irradiation : From Experiments to First-Principles Molecular Dynamics Simulation”, ELYT Workshop 2014, February 19-21, 2014, Frejus, France.</p> <p>97. Momoji Kubo, Jean Michel Martin, Maria Isabel De Barros Bouchet, “Green Lubrication with DLC Coatings and SiC: Experiments and Computer Simulations”, ELYT Workshop 2014, February 19-21, 2014, Frejus,</p>
--	--

	<p>France.</p> <p>98. Momoji Kubo, "Multi-Physics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics by First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods", International Workshop on Security Science and Engineering of Advanced Energy Systems, February 23-25, 2014, Lyon, France. (研究者が企画した会議)</p> <p>99. Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Water Lubrication Processes on Silicon Carbide Surface", International Workshop on Security Science and Engineering of Advanced Energy Systems, February 23-25, 2014, Lyon, France. (研究者が企画した会議)</p> <p>100. Shinichiro Saito, Ryota Sakanoi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, Momoji Kubo, "Computational Simulation on Fracture Properties of Gadolinia Doped Ceria Electrolytes for Solid Oxide Fuel Cell", International Workshop on Security Science and Engineering of Advanced Energy Systems, February 23-25, 2014, Lyon, France. (研究者が企画した会議)</p> <p>101. Shigeki Chieda, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles Study on Catalytic Activity and Selectivity of Transition Metal Surfaces for Ethylene Glycol Oxidation in Alkaline Fuel Cell", International Workshop on Security Science and Engineering of Advanced Energy Systems, February 23-25, 2014, Lyon, France. (研究者が企画した会議)</p> <p>102. Kosuke Nakamura, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Degradation Process Simulations on Electrode Surface in Lithium-Ion Battery by Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", International Workshop on Security Science and Engineering of Advanced Energy Systems, February 23-25, 2014, Lyon, France. (研究者が企画した会議)</p> <p>103. 久保百司、「難加工材料の化学機械研磨プロセスシミュレーション」、第2回「表面創成工学の新展開」研究会、2014年3月7日～8日、ゆぼぼ、秋田 (研究者が企画した会議)</p> <p>104. Momoji Kubo, "Development of Multi-Physics Simulator Based on First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods for Design of Chemical Reactions", CRC International Symposium: Catalysis and Technology for Green Innovation (招待講演), March 17, 2014, Sapporo, Japan.</p> <p>105. 伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学法を用いたシリコン酸化膜のエッチングプロセスにおけるエッチャントの堆積機構に関する研究」、第61回応用物理学会春季学術講演会、2014年3月17日～20日、青山学院大学相模原キャンパス、相模原</p> <p>106. 桑原卓哉、伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「量子分子動力学法を用いた a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>H のプラズマCVD成長機構に関する研究」、第61回応用物理学会春季学術講演会、2014年3月17日～20日、青山学院大学相模原キャンパス、相模原</p> <p>107. 許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「固体酸化物形燃料電池のアノードにおけるシタリングのドーパント種依存性に関する理論研究」、電気化学会第81回大会、2014年3月29日～31日、関西大学千里山キャンパス、大阪</p> <p>108. 齋藤慎一郎、樋口祐次、尾澤伸樹、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「固体酸化物形燃料電池用電解質の破壊特性に関する計算科学シミュレーション」、電気化学会第81回大会、2014年3月29日～31日、関西大学千里山キャンパス、大阪</p> <p>109. 千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理計算に基づいたアルカリ形燃料電池におけるエチレングリコール酸化触媒に関する研究」、電気化学会第81回大会、2014年3月29日～31日、関西大学千里山キャンパス、大阪</p> <p>110. 中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「化学反応によるリチウムイオン電池電極の劣化プロセスに関する量子分子動力学シミュレーション」、電気化学会第81回大会、2014年3月29日～31日、関西大学千里山キャンパス、大阪</p> <p>111. 横山直樹、樋口祐次、尾澤伸樹、湯上浩雄、久保百司、「振動励起メタンの水蒸気改質反応に関する第一原理分子動力学シミュレーション」、電気化学会第81回大会、2014年3月29日～31日、関西大学千里山キャンパス、大阪</p> <p>一般向け 計0件</p>
<p>図書 計4件</p>	<p>(掲載済み) 計4件</p> <p>1. 久保百司、「第一原理分子動力学法と Tight-Binding 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摩擦化学反応と低摩擦機構の解明」、Journal of Computer Chemistry, Japan、出版社: 日本コンピュータ化学会、12 (2013) A3-A13. ISSN 1347-1767.</p> <p>2. 尾澤伸樹、河口健太郎、久保百司、「化学反応に支配された機械研磨メカニズムの解明: 量子分子動力学シミュレーション」、Journal of Computer Chemistry, Japan、出版社: 日本コンピュータ化学会、12 (2013) A3-A13. ISSN 1347-1767.</p>



様式19 別紙1

	<p>学シミュレーションと第一原理計算」、トライボロジスト、出版社：日本トライボロジー学会、58 (2013) 616-621. ISSN 0915-1168.</p> <p>3. 尾澤伸樹、中村耕輔、樋口祐次、久保百司、「燃料電池材料の高性能化・高耐久化を目指したマルチフィジックスシミュレーション」、表面科学、出版社：日本表面科学会、34 (2013) 656-661. ISSN 0388-5321.</p> <p>4. 久保百司、「量子化学に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と「化学反応を積極的に活用した機械工学分野」の開拓」、翠巒、出版社：青葉工学振興会、28 (2014) 9-13.</p>
産業財産権 出願・取得状 況  計0件	<p>(取得済み) 計 0 件</p> <p>(出願中) 計 0 件</p>
Webページ (URL)	<p>1. ウェブページの題名:最先端・次世代研究開発支援プログラム 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 ウェブページの名称:最先端・次世代研究開発支援プログラム アクセス <a href="http://www.kubo.rift.mech.tohoku.ac.jp/NEXT/">http://www.kubo.rift.mech.tohoku.ac.jp/NEXT/</a> 内容:本プロジェクトで得た研究成果の発信のため、本プロジェクト専用のウェブページを立ち上げている。</p> <p>2. ウェブページの題目:CAT-Vnet 東北大学市民講座「未来をつくる-東北大学機械系若手研究者の挑戦-」 ウェブページの名称:無料で楽しむインターネットテレビ CAT-V NET TV アクセス <a href="http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html">http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html</a> 内容:平成 25 年 8 月 25 日(日)に開催した市民講座の様子を広く国民に公開した。</p>
国民との科 学・技術対 話の実施状 況	<p>表題:東北大学市民講座「未来をつくる-東北大学機械系若手研究者の挑戦-」 実施日:平成 25 年 8 月 25 日(日) 場所:せんだいメディアテーク 対象者:国民 参加者数:85 名 内容:研究代表者は「シミュレーションでデザインする地球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。また講演後、パネルディスカッションのように講演者5名がステージの前に着席して、参加者から次々とよせられた質問に1時間15分の時間を使って答えるという、「国民との対話」を実施した。さらに、参加者に興味を持ってもらうために、〇×クイズを準備し、〇×の大きなパネルを持った参加者にパネルを上にあげて回答してもらうという工夫を行った。 市民講座の案内と詳細は、ホームページ <a href="http://www.pfsl.mech.tohoku.ac.jp/next2013/">http://www.pfsl.mech.tohoku.ac.jp/next2013/</a>に掲載した。市民講座における前半の講演の様子と後半の国民との対話の様子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_2013_summer/001_01.html">http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html</a>)。</p>
新聞・一般雑 誌等掲載 計 1 件	<p>(掲載) 計 1 件</p> <p>1. 久保百司、「自分にしかできないことを見つけてほしい」、TCG、4月号、9-9、2013年4月1日、出版社:東北大学生生活共同組合</p>
その他	<p><b>指導した学生の日本学術振興会特別研究員への採用</b></p> <p>1. 許 競翔、日本学術振興会特別研究員 DC2、「マルチスケールエフェクトを解明可能な原子レベル燃料電池シミュレータの開発」、平成 26~27 年度</p> <p><b>指導した学生の受賞</b></p> <p>1. 小林康彦、日本コンピュータ化学会奨学賞、「量子分子動力学法に基づく炭化ケイ素膜の水潤滑シミュレーション」、日本コンピュータ化学会、2013年5月31日</p> <p>2. 河口健太郎、工学研究科長賞、「量子分子動力学法を活用した半導体エレクトロニクスにおける化学機械研磨プロセスの理論的解明」、東北大学大学院工学研究科長、2014年3月25日</p> <p>3. 會澤豪大、日本機械学会畠山賞、日本機械学会、2014年3月26日</p> <p><b>指導した助教の招待講演</b></p> <p>1. 尾澤伸樹、「化学反応を伴う機械加工プロセスのシミュレーション:研磨を例として」、大阪大学大学院工学研究科応用物理ゼミナール、2013年5月30日、大阪大学吹田キャンパス、大阪</p> <p>2. Nobuki Ozawa, "First-Principles Study of Oxidation Reaction of Ethylene Glycol on Metal Surface in Alkaline Fuel Cell", CRC International Symposium: Catalysis and Technology for Green Innovation, March 17, 2014, Sapporo, Japan.</p> <p><b>指導した助教のプロジェクトへの採用</b></p> <p>1. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業(さきがけ)、「分子技術と新機能創出」研究領域、樋口祐次、「高分子の劣化と破壊:量子化学と統計物理の融合」、平成 25~28 年度、研究代表者(樋口祐次は、平成 23 年 4 月 1 日から最先端・次世代研究開発支援プログラムの助教(研究専念教員)として採用され、平成 24 年 8 月 1 日から正規の助教に昇進した。)</p>

様式19 別紙1

4. その他特記事項

該当なし。

## 実施状況報告書(平成25年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

## 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 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額	既返還額(前 年度迄の累 計)
直接経費	100,000,000	67,010,000	32,990,000	0	0
間接経費	30,000,000	20,103,000	9,897,000	0	0
合計	130,000,000	87,113,000	42,887,000	0	0

## 2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を除 く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度執 行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額	当該年度返還 額
直接経費	1,108,768	32,990,000	0	34,098,768	34,098,768	0	0
間接経費	0	9,897,000	0	9,897,000	9,897,000	0	0
合計	1,108,768	42,887,000	0	43,995,768	43,995,768	0	0

## 3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	10,288,285	コンピュータ管理サーバ等
旅費	10,789,990	研究成果発表旅費(WTC2013国際会議)等
謝金・人件費等	6,661,544	技術補佐員人件費等
その他	6,358,949	市民講座開催費、投稿論文の英語校正料等
直接経費計	34,098,768	
間接経費計	9,897,000	
合計	43,995,768	

## 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 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
コンピュータ管理 サーバ	(米)ヒューレット・ パッカード社製 外 ProLiant ML350p Gen8 外	1	2,709,000	2,709,000	2013/10/2	東北大学
永久ライセンス 「RAMANスペクトル シミュレーションソフ トウェア」	(米)Accelrys社製	1	1,459,500	1,459,500	2013/10/2	東北大学
大規模計算用マル チフィジックス解析 コンピュータ	東北大学生生活協 同組合製 UNI- XWE3S/SS	5	299,880	1,499,400	2013/10/30	東北大学
グラフィックス解析 用コンピュータ	(中)レノボ社製 ThinkPad W530 corei7- 3840QM/RAM32 GB/HDD1TB	3	474,000	1,422,000	2013/11/26	東北大学
複雑系マルチス ケール解析コン ピュータ	東北大学生生活協 同組合製 UNI- XWE3S/SS	5	299,880	1,499,400	2013/12/16	東北大学