

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) 実績報告書

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的设计
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. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

2. 収支の状況

(単位:円)

	交付決定額	交付を受けた額	利息等収入額	収入額合計	執行額	未執行額	既返還額
直接経費	100,000,000	100,000,000	0	100,000,000	100,000,000	0	0
間接経費	30,000,000	30,000,000	0	30,000,000	30,000,000	0	0
合計	130,000,000	130,000,000	0	130,000,000	130,000,000	0	0

3. 執行額内訳

(単位:円)

費目	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	合計
物品費	397,300	15,517,192	8,891,067	10,288,285	35,093,844
旅費	0	4,963,116	8,917,817	10,789,990	24,670,923
謝金・人件費等	0	9,774,139	13,814,895	6,661,544	30,250,578
その他	2,000	1,765,170	1,858,536	6,358,949	9,984,655
直接経費計	399,300	32,019,617	33,482,315	34,098,768	100,000,000
間接経費計	180,000	9,924,000	9,999,000	9,897,000	30,000,000
合計	579,300	41,943,617	43,481,315	43,995,768	130,000,000

4. 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
並列計算用コンピュータサーバ	HPCテクノロ ジー製 DPrT5500, 30台	1	13,965,000	13,965,000	2011/8/19	東北大学
大容量メモリコンピュータサーバ	HPCテクノロ ジー製(株)製 HPC- ProServerDP rT5600	1	5,859,000	5,859,000	2012/11/22	東北大学
電子状態解析用コンピュータ	HPCテクノロ ジー製(株)製 DPrT5600	2	630,000	1,260,000	2013/3/18	東北大学
コンピューター管理サーバ	(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 活協同組合 製 UNI- XWE3S/SS	5	299,880	1,499,400	2013/10/30	東北大学

様式20

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/RA M32GB/HDD 1TB	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	東北大学生活協同組合製 UNI-XWE3S/SS	5	299,880	1,499,400	2013/12/16	東北大学

5. 研究成果の概要

当初の予定以上の5種類のマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。さらに当初の予定通り、ハイブリッド化などにより従来の100倍以上の高速化を実現した。また開発シミュレータを活用し、「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「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現象の解明を実現した。さらに、トライボロジー、原子力発電、燃料電池、プラズマディスプレイの重要4課題における低炭素化機械システムの設計を実現し、アルコールを活用した低摩擦システムなど理論的に設計した機械システムの実験的検証にも成功した。以上の結果より、世界に先駆けて、「マルチフィジックス現象の量子論的理解に基づく低炭素化機械システムの設計」という低炭素社会を実現するための新しい方法論の開拓に成功した。

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) 研究成果報告書

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名 (下段英語表記)	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
	Development of Multi-Physics Simulator Based on First-Principles Molecular Dynamics Method and Design of Low-Carbon Mechanical System
研究機関・部局・ 職名 (下段英語表記)	東北大学・大学院工学研究科・教授
	Tohoku University, Graduate School of Engineering, Professor
氏名 (下段英語表記)	久保百司
	Momoji Kubo

研究成果の概要

(和文): 低炭素化機械システムの設計を実現するために、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を実施し、当初の予定以上の「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「電位と化学反応」、「電磁波と化学反応」の5種類のシミュレータの開発に成功した。さらに、開発シミュレータを活用し、当初の予定以上のトライボロジー、原子力発電、燃料電池、プラズマディスプレイ、水素合成装置の重要5課題における低炭素化機械システムの設計を実現し、アルコールを活用した低摩擦システムなど理論的に設計した機械システムの実験的検証にも成功した。その結果、連続体理論が中心であった機械システムの設計においても、量子化学に基づくマルチフィジックス現象の理解が不可欠であるという「研究手法の大きな変革」を世界に提示し、全く新しい学問分野を立ち上げることに成功した。

(英文): In order to realize the design of low-carbon mechanical system, we aimed to develop multi-physics simulator based on first-principles molecular dynamics method and succeeded to develop five multi-physics simulators of “friction and chemical reaction”, “impact and chemical reaction”, “stress and chemical reaction”, “electric field and chemical reaction”, and “light and chemical reaction”, which exceed the initial plan and expectation. Furthermore, by utilizing the

様式21

above developed simulators, we succeeded to realize the design of five important low-carbon mechanical systems, automotive engine, nuclear power plant, fuel cell, plasma display, and hydrogen synthesis apparatus, which also exceed the initial plan. Especially, we realized the experimental verification of our theoretically designed mechanical systems such as alcohol-based low friction system. From these results, we indicate and propose to the world that understanding of multi-physics phenomena by quantum chemistry is essential for the design of mechanical system which traditionally employed continuum theory. It means that this project realizes the large innovation for research method and we succeeded to establish a new research field.

1. 執行金額 130,000,000 円
(うち、直接経費 100,000,000 円、間接経費 30,000,000 円)

2. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

3. 研究目的

グリーンイノベーションの創生と持続可能な社会の発展には、機械工学が関わる多様なエネルギーシステム・デバイスにおける低炭素技術の確立が強く求められている。具体的に低炭素社会の実現には、(1)低摩擦を実現するトライボロジーシステム、(2)長期信頼性を有する原子力発電システム、(3)CO₂の排出量を低減する燃料電池、(4)低消費電力を実現する家電製品の開発などにおいて革新的ブレイクスルーの実現が必須である。特に、近年のナノテクノロジーの発展により、機械システムの設計・開発においても、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」などが複雑に絡みあったマルチフィジックス現象の原子レベルでの深い理解が重要となっている。従来、マルチフィジックス現象の理論的検討には、連続体シミュレーションが活用されてきた。しかし、「化学反応」の解明には量子論的アプローチが必須であり、連続体理論の発展だけでは「化学反応を伴うマルチフィジックス現象の解明」というブレイクスルーの実現は不可能である。

これに対し、研究者はオリジナルに考案した SCF-Tight-Binding 量子分子動力学に基づき、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」など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、エッチング、化学機械研磨など様々な Si 半導体プロセスへの応用を実現した。しかし本手法は経験的なパラメータが必要なため未知の系に応用できず、さらに Si 半導体など限定的な系にしか応用できない問題点があった。一方、研究者は最近、経験的パラメータを使用せず、さらに対象系を限定せずに「化学反応ダイナミクス」を高精度に解明可能なオリジナルに考案した GFT 第一原理分子動力学法の開発に成功した。

そこで本研究では、上記の開発シミュレータをハイブリッド化することで、第一原理

分子動力学法に基づき非経験的に「化学反応」を扱いながら、「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」との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を世界に先駆けて開発する。これにより、従来、機械工学で活用されてきた有限要素法や流体力学などの連続体シミュレーションでは不可能な、多様なエネルギーシステム・デバイスにおける「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」の解明というブレイクスルーを実現する。さらに、(1)低摩擦を実現するトライボロジーシステム、(2)長期信頼性を有する原子力発電システム、(3)CO₂ 排出量を低減する燃料電池、(4)低消費電力を実現するプラズマディスプレイの4課題を重要ターゲットとして、従来は不可能であった「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」の量子論的理解に基づく低炭素化機械システムの理論設計を実現する。

4. 研究計画・方法

本研究では下記(1)～(3)の課題を達成することで、世界に先駆けてマルチフィジックス現象の量子論的理解に基づく機械システム設計という新規学問分野の開拓を目指す。

(1) 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

「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「電位と化学反応」の4種類のマルチフィジックスシミュレータの開発を目的とした。

(2) 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高速化

ハイブリッド法、並列化等の導入により従来法より100倍以上の高速化を目的とした。

(3) マルチフィジックス現象の解明と低炭素化機械システムの設計

開発シミュレータを活用し「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「電位と化学反応」の4種類のマルチフィジックス現象を解明する。さらにマルチフィジックス現象の量子論的理解に基づき、トライボロジー、原子力発電、燃料電池、プラズマディスプレイの重要4課題における低炭素化機械システムの理論設計を実現する。

5. 研究成果・波及効果

(1) 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

① 「摩擦と化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発

2枚の摩擦基板をモデル化し、その片方の基板のみを横方向に一定速度でスライドさせる機能を付加することで、「摩擦と化学反応」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を開発した。

② 「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

分子に速度を与え基板や分子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シミュレータを開発した。

③ 「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

基板や分子に外部から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シミュレータを開発した。

④ 「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

原子核の電荷を小数点を許可して変化させる機能を付加することで、「電位と化学反応」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シミュレータを開発した。

⑤マルチフィジックスシミュレータへの「流体と伝熱」の効果の組み込み

水などの流体が一定方向に流れる機能、温度制御を任意の位置に設定し熱分布を持たせる機能を導入することで、開発したシミュレータに「流体と伝熱」の効果を組み込んだ。

⑥「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

当初の予定にはなかったが、分子の振動を加速する機能を付加することで、「赤外光による振動励起と化学反応」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シミュレータも開発した。

(2) 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高速化

古典分子動力学法とのハイブリッド手法の開発、MPI を用いた並列化、水素の高速計算手法の開発、高速な収束計算アルゴリズムの導入により、シミュレータの高速化を実現した。その結果、従来法に比較して、100 倍以上の高速計算を実現した。

(3) マルチフィジックス現象の解明と低炭素化機械システムの設計

①「摩擦と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明

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(DLC)の摩擦挙動について開発シミュレータを活用して検討を行った。その結果、図1に示すようにDLCを終端する水素原子同士の反発によって、摩擦係数 0.03 という低摩擦が実現できることを明らかにした。さらに、摩擦によって終端水素同士が化学反応を起こし、水素分子が生成する摩擦化学反応も明らかにした。また水素分子の生成により、基板間の距離が広がり摩擦係数がさらに減少することも示された。一方、摩擦基板に高荷重を与えた場合には、摩擦界面で炭素-炭素結合が生成する異なる化学反応が観察された(図2)。また摩擦界面で炭素-炭素結合が生成することで、摩擦係数が10倍以上増加することも明らかにした。機械工学の教科書には、「摩擦係数は荷重に依存しない」との記述がある。これは、従来の教科書では摩擦界面で化学反応が起こることを全く想定していないことによるものであり、本結果は、「摩擦界面で化学反応が起こる場合には、摩擦係数は荷重に依存する」という従来の教科書を書き換える成果である。さらに実験的にも検証された。

②「衝撃と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明

固体高分子形燃料電池(PEFC)の長寿命化の実現には、電解質の分解に代表される材料の耐久性の向上が重要課題である。PEFCの電解質として広く使用されているナフィオ

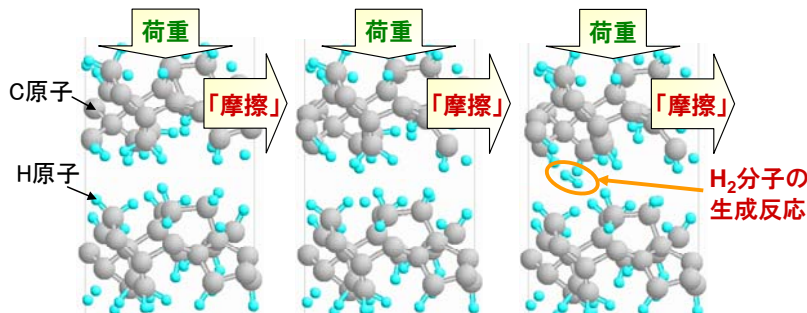


図1 第一原理分子動力学法による水素終端ダイヤモンドライクカーボンの摩擦化学反応ダイナミクス

ンは、白金触媒上で生成した OH ラジカルによって劣化することが実験的に知られている。そこで、ナフィオンの主鎖末端である COOH 基に、OH ラジカルを衝突させた時のシミュレーションを行った。その結果、図 3 に示すように COOH 基の H と OH ラジカルが反応し、10fs 後には H₂O 分子が生成・脱離、さらに 175fs 後には主鎖末端から CO₂ 分子が脱離する化学反応ダイナミクスが明らかにされた。さらに、この主鎖末端の C ラジカルに 2 個目の OH ラジカルを攻撃させた。その結果、OH 基の H 原子が末端 CF の F 原子に近づくことで、HF 分子が生成・脱離する化学反応が明らかにされた (図 4)。CO₂ 分子や HF 分子の発生は実験的にも確認されており、開発シミュレータの妥当性が証明された。

③「応力と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明

原子力発電の安全性・長期信頼性の確保には、ケーブルの耐久性の向上が重要課題である。そこで、ケーブルの主成分であるポリエチレンの応力による劣化プロセスについて検討した。ケーブルは炭素ラジカルの生成とその後の酸化反応によって劣化が開始することが知られている。そこで、図 5(a) に示す酸化したポリエチレンに対して、引っ張り応力をかけてシミュレーションを行った。その結果、図 5(c) に示す炭素-炭素結合の切断反応が観察された。この時のエネルギー変化 (図 6) から、この切断反応の活性化バリアは約 13 kcal/mol であると理解された。また、圧縮応力による切断した部分の再結合過程についても計算を行った。その結果、図 6 に示すように再結合過程の方がバリアが高く、切断が優先的に進行することが明らかとなった。ここで、静的な第一原

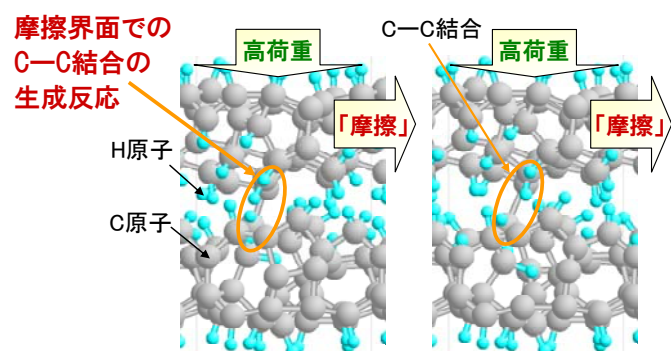


図 2 第一原理分子動力学法による高荷重下における水素終端ダイヤモンドライクカーボンの摩擦化学反応ダイナミクス

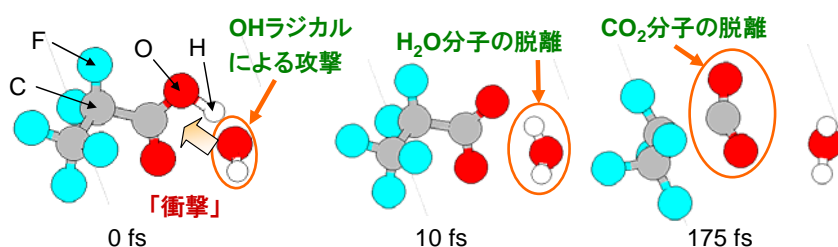


図 3 第一原理分子動力学法によるナフィオンへの OH ラジカルの衝突反応ダイナミクス

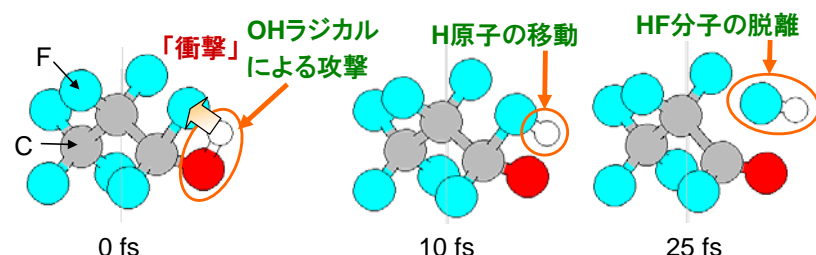


図 4 第一原理分子動力学法によるナフィオンへの 2 個目の OH ラジカルの衝突反応ダイナミクス

理計算を行うと切断の活性化バリアは 13.5 kcal/mol であるのに対し、再結合の活性化バリアは 6.9 kcal/mol と逆に低い値となった。これは、我々の第一原理分子動力学法の結果と異なる。詳細な解析の結果、ダイナミクス計算を行うと、再結合時に水素原子同士が反発することで活性化バリアが高くなり、静的な第一原理計算ではその効果を取り込めないことが明らかとなった。実験結果ともこの現象は一致し、静的な第一原理計算より我々の開発した第一原理分子動力学法の方が計算精度が高いことが証明された。

④「電位と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明

Li イオン電池を搭載した電気自動車の普及が切望されている。Li イオン電池においては電解質の溶媒が電極上で反応して、SEI と呼ばれる被膜が形成されることが劣化の重要な原因である。また、表面電位がこの SEI 被膜の形成に影響を与えることが実験的に示されている。そこで、カーボン負極を構成する炭素の原子核の電荷を +6 ではなく小数点を許可して、+5.95、+6.05 のように変化させることで電位の影響を調べた。その結果、例えば原子核の電荷を +6.05 にすると、逆に周りの電子を引き付けて、炭素原子自体は負の電荷となる興味深い現象が明らかとなった。

⑤「電磁波と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明

東北大学の湯上研究室で実験が行われている水とメタンを赤外光により振動励起させることで、水素を発生させるプロセスに関してシミュレーションを行い、実験では確認できなかったメタノール等の中間体の存在を明らかにした。

⑥低炭素化トライボロジーシステム的设计

低炭素化トライボロジーシステム的设计を目的に、DLC の一部を窒化した CN_x の摩擦シミュレーションを行った。その結果、摩擦界面での窒素-窒素の反発により、DLC よりも低い摩擦係数が得られることを明らかにした。また水素終端 DLC の終端の一部を OH に置換した OH 終端 DLC の摩擦シミュレーションを行った。その結果、OH 終端の場合、OH 基がかさ高いために摩擦基板間の距離が広がり、高荷重下で炭素-炭素結合が生成する問題点、それにより摩擦係数が上昇する問題点を防止できることを提言した。また

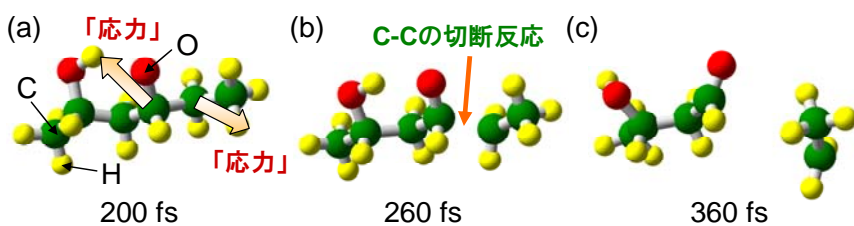


図5 第一原理分子動力学法による酸化したポリエチレンの「応力と化学反応」のマルチフィジックス現象

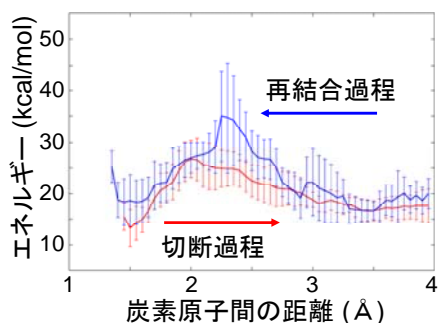


図6 酸化したポリエチレンの応力下での化学反応ダイナミクスのエネルギー変化
— 切断過程と再結合過程

OH 終端化はメタノール環境下での摩擦化学反応を利用して実現できることを提言し、後にフランスの Prof. John-Michel Martin により実験的に検証された。

⑦燃料電池システムの設計

上記②の図4で説明したPEFCの劣化機構に関して、実際にはナフィオンの周りには多くの水分子が存在することから、主鎖末端の周囲に H_2O が存在する場合についても計算を行った。その結果、水分子が存在しない場合のHF分子生成の活性化バリアは44.8 kcal/molであるのに対し、水分子が存在する場合の活性化バリアは22.5 kcal/molと低く劣化しやすいことがわかった。これらの結果は低含水率の燃料電池を設計することでCOOH基の耐久性が向上するという設計指針を示している。さらに、ナフィオンの SO_3H 基のOHラジカルによる劣化反応についても検討し、 SO_3H 基の隣の炭素原子に結合したF原子をH原子に置換することで、 SO_2 の脱離による劣化を防止できることも示した。

⑧原子力発電システム、プラズマディスプレイ、水素合成装置の設計

スペースの関係で詳細は割愛するが、原子力発電に関してはケーブルを構成するポリマー材料の結晶層とアモルファス層で劣化挙動が大きく異なり、結晶層の方が劣化しやすく、アモルファス層を増やすことで耐久性が向上することを提言した。またプラズマディスプレイに関しては、ナノドット構造を有するMgO二次電子エミッターの作製により、低消費電力が実現できることを予測し、実験的に実証された。さらに、当初の予定にはなかったが、振動励起を活用した水素合成装置の作動条件の設計にも成功した。

<関連する研究分野における研究成果の具体的な寄与>

機械工学分野において従来の連続体理論をいくら発展させても「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」の解明というブレイクスルーの実現は不可能である。本研究で開発した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は世界的にも例が無く、連続体理論が中心の機械工学分野において、全く新しい学問分野を立ち上げることに成功した。また本研究では、マルチフィジックス現象の量子論的な理解に基づき低炭素化機械システムを理論的に設計した。これは、機械工学分野においても量子化学が不可欠であるという「研究開発手法の大きな変革」を世界に提示したものである。

<研究成果の社会的、経済的課題の解決への具体的な貢献>

自動車のエンジンの出力エネルギーの約30%が摩擦に消費されていることから、自動車エンジンの摩擦低減による CO_2 排出量の削減が強く求められている。それに対し本研究では、自動車エンジン用の低摩擦材料として窒素ドーブまたはOH終端したDLCが有効であることを理論的に提言した。また、発電所から排出される CO_2 は日本全体の34%を占めることから、エネルギー効率が高く、 CO_2 の排出量を低減する燃料電池の実用化が求められている。ここでPEFCの実用化には電解質の耐久性が問題となっているが、本研究により低含水率の実現やF原子のH原子への置換により電解質の耐久性が向上するという設計指針を提言した。さらに、前述のように原子力発電の安全性・長期信頼性の確保、プラズマディスプレイの低消費電力化のための設計指針の提言にも成功した。

6. 研究発表等

雑誌論文 計 14 件	<p>(掲載済み—査読有り) 計 14 件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 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, J. Phys. Chem. C, 115 (2011) 22981–22986. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp207065n 2. 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, J. Chem. Phys., 135 (2011) 241103. ISSN 0021–9606, http://jcp.aip.org/resource/1/jcpsa6/v135/i24/p241103_s1?bypassSSO=1 3. Tomomi Shimazaki and Momoji Kubo, Efficient Density Functional Theory Calculations with Weak Hydrogen Quantum Effect: Electron Density Analysis, Chem. Phys. Lett., 525–526 (2012) 134–139. ISSN 0009–2614, http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261411015703 4. 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, Faraday Discuss., 156 (2012) 137–146. ISSN 0301–7249, http://xlink.rsc.org/?DOI=c2fd00125j 5. 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, J. Phys. Chem. C, 116 (2012) 12559–12565. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp300937n 6. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo, Development of Crystal Growth Simulator Based on Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Silicon Chemical Vapor Deposition Processes, J. Phys. Chem. C, 116 (2012) 12525–12531. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp3002542 7. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, and Momoji Kubo, Chemical Reaction Dynamics of SiO₂ Etching by CF₂ Radicals: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, Jpn. J. Appl. Phys., 52 (2013) 026502. ISSN 0021–4922, http://jap.jsap.jp/link?JJAP/52/026502/ 8. 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, J. Phys. Chem. C, 117 (2013) 9663–9672. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp310920d 9. Tasuku Onodera, Minseok Park, Kenichi Souma, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo, Transfer Film Formation Mechanism of Polytetrafluoroethylene: A Computational Chemistry Approach, J. Phys. Chem. C, 117 (2013) 10464–10472. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp400515j 10. 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 SiH₃ and SiH₂ Radicals: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, J. Phys. Chem. C, 117 (2013) 15602–15614. ISSN 1932–7447, http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp4021504 11. 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, ECS Trans., 57 (2013) 2459–2464. ISSN 1938–6737, http://ecst.ecsdl.org/content/57/1/2459 12. Hiromitsu Takaba, Huifeng Zhong, Hideyuki Tsuboi, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, Application of Reaction Time Accelerating Molecular Dynamics to Modeling of
----------------	---

	<p>Metallocene-Catalyzed Ethylene/1-butene Copolymerization, J. Comput. Chem. Jpn., 12 (2013) 43-51. ISSN 1347-1767, http://dx.doi.org/10.2477/jccj.2012-0025</p> <p>13. Satoshi Akamaru, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, and Takayuki Abe, Density Functional Theory Analysis of Methanation Reaction of CO₂ on Ru Nanoparticle Supported on TiO₂(101), Appl. Catal. A, 470 (2014) 405-411. ISSN 0926-860X, http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2013.11.016</p> <p>14. 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 CeO₂; Density Functional Theory Calculations, J. Chem. Phys., 140, (2014) 121102. ISSN 0021-9606, http://dx.doi.org/10.1063/1.4869515</p> <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 253 件</p>	<p>専門家向け 計 253 件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Momoji Kubo, "Multi-Physics Simulation by Quantum Chemical Molecular Dynamics", International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (Invited Talk), April 18-21, 2011, Nanjing, China. 2. 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 3. 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 4. 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 5. 石川幸幸、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「CeO₂ 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 6. 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 7. Momoji Kubo, Kentaro Hayashi, Kotoe Tezuka, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, "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. 8. 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的设计」、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 9. 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 10. 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」、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会&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 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&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 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&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>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 & 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の理論設計」、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ライク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 SiO₂ のフルオロカーボンラジカル CF₂ 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、「ダイヤモンドライク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～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 CeO₂ 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～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～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～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 CF₂ によるシリコン酸化膜 SiO₂ 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～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～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～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 Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), September 28-30,</p>

	<p>2011, Aichi Industry & Labor Center (WINC AICHI), Nagoya, Japan.</p> <p>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)</p> <p>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)</p> <p>32. Muneyuki Ishikawa, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "A Study of Chemical Mechanical Polishing Process of Glass Surface Using CeO₂ 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)</p> <p>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)</p> <p>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)</p> <p>35. Muneyuki Ishikawa, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Analysis of Chemical Mechanical Polishing Mechanism of Glass Surface Using CeO₂ 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)</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>40. Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation of Highly Selective CF_x Radical Etching of SiO₂", International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, December 4-9, 2011, Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.</p> <p>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,</p>
--	--

	<p>Kaanapali, Maui, Hawaii, USA.</p> <p>42. Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "The Effects of Chemical Aging on the Craze 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.</p> <p>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 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 (Invited Talk), 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 (Invited Talk), 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_x 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_x 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,</p>
--	--

	<p>Momiji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to Silicon-Dioxide Etching Processes by CF_x 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, Momiji 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. Momiji 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, Momiji 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, Momiji Kubo, "Interactions between Grains - Better Understanding the Sintering Process and the Grain Evolution", Annual Workshop of ELYT Laboratory, March 12-14, 2012, Hyeres, 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～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～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_2 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～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～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～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_2 の CF_x 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～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～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～31 日、アクティシティ浜松、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リ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～31 日、アクティシティ浜松、静岡</p> <p>67. 久保百司、「計算科学手法による CeO_2 スラリーの化学機械研磨特性の解析及び代替砥粒設計」、砥粒加工学会次世代固定砥粒加工プロセス専門委員会第 42 回研究会(招待講演)、2012 年 4 月 20 日、サピアタワー、東京</p> <p>68. Muneyuki Ishikawa, Kentaro Kawaguchi, Miho Nakamura, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momiji Kubo, "First-Principles Study on Chemical Reaction in CMP Process of Glass Surface by CeO_2 Particle", International Association of Colloid and Interface Scientists 2012, May 13-18, 2012, Sendai, Japan.</p>
--	---

	<p>69. Kentaro Kawaguchi, Muneyuki Ishikawa, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Study of Cu Chemical Mechanical Polishing Process Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", International Association of Colloid and Interface Scientists 2012, May 13-18, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>70. Seiichiro Sato, Kentaro Hayashi, Shandan Bai, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Tribo-Chemical Reaction Dynamics Simulation of Carbon Nitride Films Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method", International Association of Colloid and Interface Scientists 2012, May 13-18, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>71. 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化学機械研磨プロセスの解析」、トライボロジー会議2012春、2012年5月14日～16日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</p> <p>72. 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、「窒化炭素膜界面における低摩擦特性の量子分子動力学法による研究」、トライボロジー会議 2012 春、2012年5月14日～16日、国立オリンピック記念青少年総合センター、東京</p> <p>73. 樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理分子動力学法と粗視化分子動力学法によるポリエチレンの劣化機構の解明」、日本コンピュータ化学会 2012 年春季年会、2012年5月17日～18日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>74. 小林 顕、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「第一原理分子動力学法による PEFC 電解質の劣化プロセスシミュレーション」、日本コンピュータ化学会 2012 年春季年会、2012年5月17日～18日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>75. 柳谷一行、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 GaN の Cl ラジカルエッチングプロセスの解析」、日本コンピュータ化学会 2012 年春季年会、2012年5月17日～18日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>76. 久保百司、「化学反応を制御した機械工学分野の確立」、JST ナノテクノロジー・材料分野俯瞰に関するワークショップ(招待講演)、2012年5月21日、科学技術振興機構東京本部、東京</p> <p>77. Jiwang Yan, Fuminori Kobayashi, Momoji Kubo, Tsunemoto Kuriyagawa, "Atomic Subsurface Integrity Improvement for Curved and Micro-Structured Silicon Surface by Laser Irradiation", 12th Euspen International Conference, June 4-8, 2012, Stockholm, Sweden.</p> <p>78. 久保百司、「色素増感型太陽電池の量子論に基づくマルチスケールシミュレータの開発と応用」、有機太陽電池シンポジウム(招待講演)、2012年6月22日、東京工業大学大岡山キャンパス、東京</p> <p>79. Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics", 14th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis(招待講演), June 26-30, 2012, Vlissingen, The Netherlands.</p> <p>80. 白 珊丹、佐藤誠一、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、Jean-Michel Martin、久保百司、"Tribo-Chemical Mechanism of Hydrogen and Fluorine Terminated Diamond Like Carbon Film: A Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Investigation", 第5回流動ダイナミクス国際若手研究発表会、2012年7月12日、東北大学流体科学研究所、仙台</p> <p>81. 許 競翔、坂之井遼太、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、"The Effect of Doped Zirconia Surface on the Sintering Process of Nickel Nanoparticles: A Molecular Dynamics Simulation Study", 第5回流動ダイナミクス国際若手研究発表会、2012年7月12日、東北大学流体科学研究所、仙台</p> <p>82. 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固液界面の化学反応ダイナミクス」、ISSP ワークショップ「表面・界面における輸送と変換」(招待講演)、2012年7月13日～14日、東京大学物性研究所、柏</p> <p>83. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation and Mechanism Analysis of Silicon-Dioxide Etching Process by CF_x Radicals", International Conference on Nanoscience and Nanotechnology 2012, July 23-27, 2012, Paris, France.</p> <p>84. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Silicon Chemical Vapor</p>
--	---

	<p>Deposition Process for Solar Cells”, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology 2012, July 23–27, 2012, Paris, France.</p> <p>85. Ryota Sakanoi, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Computational Simulation on Fracture Properties of Gadolinium-Doped Ceria Electrolytes for Highly Durable Solid Oxide Fuel Cell”, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology 2012, July 23–27, 2012, Paris, France.</p> <p>86. 桑原卓哉、伊藤 寿、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子化学計算手法を用いた薄膜シリコン太陽電池の PECVD 成長メカニズムの解明」、第5回半導体若手ワークショップ、2012年7月30日～31日、東北大学金属材料研究所、仙台</p> <p>87. 許 競翔、坂之井遼太、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「分子動力学シミュレーションによる固体酸化物形燃料電池アノードのシタリングに及ぼすドーパントの影響」、日本機械学会 2012 年度年次大会、2012 年 9 月 9 日～12 日、金沢大学角間キャンパス、金沢</p> <p>88. 坂之井遼太、許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「計算科学シミュレーションを用いた固体酸化物形燃料電池用ガドリニアドープセリア電解質の破壊メカニズムの解明」、日本機械学会 2012 年度年次大会、2012 年 9 月 9 日～12 日、金沢大学角間キャンパス、金沢</p> <p>89. 小林 顕、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「第一原理分子動力学法を用いた高分子電解質膜の劣化シミュレーション」、日本機械学会 2012 年度年次大会、2012 年 9 月 9 日～12 日、金沢大学角間キャンパス、金沢</p> <p>90. 佐藤誠一、林健太郎、白 珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、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窒化炭素膜界面の低摩擦発現機構に関する研究」、日本機械学会 2012 年度年次大会、2012 年 9 月 9 日～12 日、金沢大学角間キャンパス、金沢</p> <p>91. 樋口祐次、石川岳志、尾澤伸樹、久保百司、「第一原理分子動力学法と粗視化分子動力学法による化学反応で劣化した高分子の応力測定」、2012 年第 73 回応用物理学学会秋季学術講演会、2012 年 9 月 11 日～14 日、愛媛大学・松山大学、愛媛</p> <p>92. 伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学シミュレーションを用いた CF_x ラジカルによるシリコン酸化膜 SiO_2 のエッチングプロセス解析」、2012 年第 73 回応用物理学学会秋季学術講演会、2012 年 9 月 11 日～14 日、愛媛大学・松山大学、愛媛</p> <p>93. 桑原卓哉、伊藤 寿、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「量子分子動力学法を用いた薄膜シリコン太陽電池の CVD プロセスにおける SiH_x ラジカルの表面反応機構の検討」、2012 年第 73 回応用物理学学会秋季学術講演会、2012 年 9 月 11 日～14 日、愛媛大学・松山大学、愛媛</p> <p>94. 柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、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 Cl_2 プラズマガスを用いた GaN のエッチングシミュレーション」、2012 年第 73 回応用物理学学会秋季学術講演会、2012 年 9 月 11 日～14 日、愛媛大学・松山大学、愛媛</p> <p>95. 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」、トライボロジー会議 2012 秋(基調講演)、2012 年 9 月 16 日～18 日、室蘭工業大学、室蘭</p> <p>96. 白 珊丹、佐藤誠一、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、久保百司、「計算科学を用いた水素及びフッ素終端 DLC 膜におけるトライボケミカル反応メカニズムの解明」、トライボロジー会議 2012 秋、2012 年 9 月 16 日～18 日、室蘭工業大学、室蘭</p> <p>97. 河口健太郎、石川岳志、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シリコンウェハの精密研磨プロセスの解析」、トライボロジー会議 2012 秋、2012 年 9 月 16 日～18 日、室蘭工業大学、室蘭</p> <p>98. 佐藤誠一、白 珊丹、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、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窒化炭素膜の低摩擦メカニズムの解明」、トライボロジー会議 2012 秋、2012 年 9 月 16 日～18 日、室蘭工業大学、室蘭</p> <p>99. 樋口祐次、石川岳志、尾澤伸樹、久保百司、「酸素と高分子の化学反応が耐久性に与える影</p>
--	--

	<p>響」、日本物理学会第 67 回年次大会、2012 年 9 月 18 日～21 日、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス、西宮</p> <p>100. Shandan Bai, Seiichiro Sato, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Low Friction Mechanism of Hydrogen and Fluorine Terminated Diamond Like Carbon Film Using Tight-Binding Quantum Chemical and First-Principles Molecular Dynamics Methods", The Ninth International Conference on Flow Dynamics, September 19-21, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>101. Jingxiang Xu, Ryota Sakanoi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida, Momoji Kubo, "Investigation of Dopant Effects on Sintering Process in Solid Oxide Fuel Cell Anode Based on Molecular Dynamics Simulation", The Ninth International Conference on Flow Dynamics, September 19-21, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>102. Kang Zhou, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Molecular Dynamics Study on Recycling Mechanism of Used CeO₂ Abrasive Grain for CMP of Glass Surface", The Ninth International Conference on Flow Dynamics, September 19-21, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>103. Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Multi-Physics Phenomena for Process and Material Design", 2012 1st International Conference on Material Chemistry: Theoretical, Computational and Experimental Perspectives(基調講演), September 20-21, 2012, Taipei, Taiwan.</p> <p>104. 樋口祐次、石川岳志、尾澤伸樹、久保百司、「酸化反応によるポリエチレンの劣化プロセス：第一原理分子動力学法と粗視化分子動力学法による解明」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>105. 伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、寒川誠二、久保百司、「量子分子動力学シミュレーションを用いたフルオロカーボンラジカル CF_xによる SiO₂ エッチングプロセスのメカニズム」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>106. 桑原卓哉、伊藤 寿、石川岳志、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薄膜シリコン太陽電池の化学気相成長メカニズムの解明」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>107. 坂之井遼太、許 競翔、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「高耐久性 SOFC の実現に向けた計算科学シミュレーションによる電解質の破壊特性評価」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>108. 河口健太郎、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「砥粒の摩擦が促進する Cu 化学機械研磨プロセスの計算科学シミュレーション」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>109. 小林 顕、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、久保百司、「第一原理分子動力学法による高分子電解質膜の化学的劣化機構の解析」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>110. 佐藤誠一、白 珊丹、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、足立幸志、久保百司、「量子分子動力学法による窒化炭素膜とダイヤモンドライクカーボン膜の低摩擦機構の研究」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>111. 柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司、「Cl ラジカルによる GaN エッチング過程の量子分子動力学法に基づく解析」、第 110 回触媒討論会、2012 年 9 月 24 日～26 日、九州大学伊都キャンパス、福岡</p> <p>112. Kentaro Kawaguchi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Mechano-Chemical Reactions during Copper Chemical Mechanical Polishing Processes", PRiME 2012, October 7-12, 2012, Hawaii, USA.</p> <p>113. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation of the Chemical Degradation of Polymer Electrolyte Membranes", PRiME 2012, October 7-12, 2012, Hawaii, USA.</p> <p>114. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki,</p>
--	--

	<p>Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics and First-Principles Molecular Dynamics Studies of Super-Low Friction Mechanism on Carbon Nitride Coatings", PRiME 2012, October 7-12, 2012, Hawaii, USA.</p> <p>115. Kazuyuki Yanagiya, Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation of GaN Etching Processes by Cl Radical", PRiME 2012, October 7-12, 2012, Hawaii, USA.</p> <p>116. Momoji Kubo, "First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design of Chemical Reactions in Mechanical Engineering", 17th Malaysian Chemical Congress(招待講演), October 15-17, 2012, Kuala Lumpur, Malaysia.</p> <p>117. 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固液界面のトライボケミカル反応ダイナミクス」、ナノプローブテクノロジー第167委員会第68回研究会「固液界面の局所構造に迫る」(招待講演)、2012年10月18日～19日、旅館清山、福島</p> <p>118. Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Chemical Vapor Deposition and Etching Processes", The 7th General Meeting of ACCMS-VO(招待講演), November 23-25, 2012, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>119. Kentaro Kawaguchi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Mechano-Chemical Reactions on Copper Chemical Mechanical Polishing Processes Studied by Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations", The Seventh General Meeting of ACCMS-VO, November 23-25, 2012, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>120. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Chemical Degradation Process of Nafion Main Chain Studied by First-Principles Molecular Dynamics Simulations", The Seventh General Meeting of ACCMS-VO, November 23-25, 2012, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>121. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, "Low Friction Mechanism of Carbon Nitride Coatings Based on First-Principles Molecular Dynamics and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods", The Seventh General Meeting of ACCMS-VO, November 23-25, 2012, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>122. Kazuyuki Yanagiya, Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Plasma Etching Processes Simulation of Gallium Nitride by Quantum Chemical Molecular Dynamics Study", The Seventh General Meeting of ACCMS-VO, November 23-25, 2012, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>123. Momoji Kubo, "Tribochemical Reaction Dynamics of Diamond-Like Carbon System by First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods", 2012 Materials Research Society Fall Meeting(招待講演), November 26-30, 2012, Boston, USA.</p> <p>124. Momoji Kubo, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation on Polymer Electrolyte Fuel Cell System", Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage(招待講演), January 16-18, 2013, Taipei, Taiwan.</p> <p>125. Yuji Higuchi, Takeshi Ishikawa, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles and Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations on the Stretching Process of Polymers", Self-Organization and Emergent Dynamics of Active Soft Matter, February 18-20, 2013, Kyoto, Japan.</p> <p>126. Yuji Higuchi, Takeshi Ishikawa, Nobuki Ozawa, Laurent Chazeau, Jean-Yves Cavaille, Tetsuo Shoji, Momoji Kubo, "Degradation and Toughness of Polymers under Gamma Irradiation Studied by First-Principles and Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations", The 1st Tsinghua Univ.-Tohoku Univ. Mini-Workshop, February 27-28, 2013, Beijing, China. (研究者が企画した会議)</p> <p>127. Kentaro Kawaguchi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Chemical Mechanical Polishing Processes using SiO₂ Abrasive Grain for Semiconductor Wafers", The 1st Tsinghua Univ.-Tohoku Univ. Mini-Workshop, February 27-28, 2013, Beijing, China. (研究者が企画した会議)</p> <p>128. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles</p>
--	--

	<p>Molecular Dynamics Simulation of Polymer Electrolyte Membrane Degradation by Attack of Hydroxyl Radical”, The 1st Tsinghua Univ.-Tohoku Univ. Mini-Workshop, February 27-28, 2013, Beijing, China. (研究者が企画した会議)</p> <p>129. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Jean-Michel Martin, Koshi Adachi, Momoji Kubo, “Influence of Nitrogen Atoms on Friction Behavior of CN_x Coatings by First-Principles Molecular Dynamics and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods”, The 1st Tsinghua Univ.-Tohoku Univ. Mini-Workshop, February 27-28, 2013, Beijing, China. (研究者が企画した会議)</p> <p>130. Kazuyuki Yanagiya, Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Etching Behavior of Gallium Nitride by Chlorine Radical Studied by Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation”, The 1st Tsinghua Univ.-Tohoku Univ. Mini-Workshop, February 27-28, 2013, Beijing, China. (研究者が企画した会議)</p> <p>131. Momoji Kubo, “First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Chemical Mechanical Polishing Processes”, NIC Workshop “Hybrid Particle-Continuum Methods in Computational Materials Physics”(招待講演), March 4-7, 2013, Julich, Germany.</p> <p>132. 久保百司、「コンピュータシミュレーションによる材料開発」、高分子学会化学未来研究会(招待講演)、2013年3月19日、丸善石油化学本社、東京</p> <p>133. 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制御した機械システム的设计」、日本化学会第93春季年会(受賞講演)、2013年3月22日~25日、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、滋賀</p> <p>134. 樋口祐次、石川岳志、尾澤伸樹、久保百司、「ポリエチレンの切断反応が半結晶高分子の耐久性に与える影響」、日本物理学会第68回年次大会、2013年3月26日~29日、広島大学東広島キャンパス、広島</p> <p>135. 伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、寒川誠二、久保百司、「フルオロカーボンラジカルによるシリコン酸化膜 SiO_2 エッチングプロセスへの量子分子動力学法アプローチ」、2013年第60回応用物理学会春季学術講演会、2013年3月27日~30日、神奈川工科大学、神奈川</p> <p>136. 桑原卓哉、伊藤 寿、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、「薄膜 Si 太陽電池のプラズマ CVD プロセスにおけるラジカル種の影響に関する量子化学計算」、2013年第60回応用物理学会春季学術講演会、2013年3月27日~30日、神奈川工科大学、神奈川</p> <p>137. 柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、石川岳志、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 エッチング過程における反応メカニズムの解析」、2013年第60回応用物理学会春季学術講演会、2013年3月27日~30日、神奈川工科大学、神奈川</p> <p>138. 許 競翔、坂之井遼太、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「分子動力学法を用いた固体酸化物形燃料電池アノードにおけるドーパントがシンタリングに及ぼす影響の解析」、電気化学会第80回大会、2013年3月29日~31日、東北大学川内キャンパス、仙台</p> <p>139. 坂之井遼太、許 競翔、石川岳志、樋口祐次、尾澤伸樹、佐藤一永、橋田俊之、久保百司、「分子動力学法及び密度汎関数法による SOFC 用電解質の亀裂進展メカニズムの解析」、電気化学会第80回大会、2013年3月29日~31日、東北大学川内キャンパス、仙台</p> <p>140. 小林 顕、石川岳志、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分解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80回大会、2013年3月29日~31日、東北大学川内キャンパス、仙台</p> <p>141. 千枝繁樹、石川岳志、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酸化触媒反応の第一原理シミュレーション」、電気化学会第80回大会、2013年3月29日~31日、東北大学川内キャンパス、仙台</p> <p>142. 中村耕輔、石川岳志、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リチウムイオン電池の劣化プロセスの解析」、電気化学会第80回大会、2013年3月29日~31日、東北大学川内キャンパス、仙台</p> <p>143. 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</p>
--	---

	<p>144. 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.</p> <p>145. 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</p> <p>146. 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</p> <p>147. 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</p> <p>148. 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</p> <p>149. 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エ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</p> <p>150. 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</p> <p>151. 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</p> <p>152. 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</p> <p>153. 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</p> <p>154. 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</p> <p>155. 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</p> <p>156. 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</p> <p>157. 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.</p> <p>158. 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.</p> <p>159. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Chemical Degradation Process in Perfluorosulfonic Acid</p>
--	--

	<p>Membranes”, The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, August 4-9, 2013, Hawaii, USA.</p> <p>160. 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.</p> <p>161. Momoji Kubo, “Tribochemical 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.</p> <p>162. Nobuki Ozawa, Miho Nakamura, Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, “First-Principles Calculation on CMP Process of Glass Surface by CeO₂ Particle and Design of Alternative Abrasive Grain”, Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.</p> <p>163. 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.</p> <p>164. 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.</p> <p>165. Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Chemical Mechanical Polishing Processes for Silicon Wafer by SiO₂ Abrasive Grain”, Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.</p> <p>166. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean-Michel Martin, Momoji Kubo, “Influence of Nitrogen on Friction Properties of CN_x Coatings Based on First-Principles Molecular Dynamics and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods”, Tribo-Lyon 2013, September 4-6, 2013, Lyon, France.</p> <p>167. 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</p> <p>168. 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</p> <p>169. 小林 顕、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</p> <p>170. 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</p> <p>171. 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</p> <p>172. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation on Atomistic Mechanisms of SiO₂ Etching Process by Fluorocarbon Radicals”, 246th American Chemical Society National Meeting & Exposition, September 8-12, 2013, Indiana, USA.</p> <p>173. 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.</p> <p>174. 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.</p>
--	--

	<p>175. 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.</p> <p>176. 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.</p> <p>177. 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.</p> <p>178. 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.</p> <p>179. 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.</p> <p>180. 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α-Al₂O₃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</p> <p>181. 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SiO₂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</p> <p>182. 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</p> <p>183. 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Ga_N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</p> <p>184. 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ン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</p> <p>185. 小林 顕、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、秋田大学手形キャンパス、秋田</p> <p>186. 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>187. 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>188. 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>189. 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>190. 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>191. Shandan Bai, Yoshihiko Kobayashi, Seiichiro Sato, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi,</p>
--	---

	<p>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>192. 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>193. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, "A Theoretical Study on Plasma Etching Processes of SiO₂ 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>194. 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>195. 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>196. 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>197. 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>198. 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イ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>199. 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>200. 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 & TIMT Joint International Symposium on Tribology(招待講演), October 7, 2013, Sendai, Japan.</p> <p>201. 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 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>202. 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ン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 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>203. 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 CF_x ラジカルによる SiO₂ 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>204. 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>205. 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</p>
--	---

	<p>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>206. 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>207. 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>208. 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>209. 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>210. 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>211. 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>212. 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>213. 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>214. 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>215. 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>216. 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 α-Al₂O₃ 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>217. 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>218. 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>219. 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>220. 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>221. Nobuki Ozawa, Miho Nakamura, Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Momoji Kubo, "First-Principles Study on CMP Process of Glass Surface by Perovskite Oxide Abrasive</p>
--	--

	<p>Grain”, The 8th General Meeting of ACCMS-VO, November 7-9, 2013, Sendai & Matsushima, Japan.</p> <p>222. 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 & Matsushima, Japan.</p> <p>223. 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 & Matsushima, Japan.</p> <p>224. 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 & Matsushima, Japan.</p> <p>225. 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>226. Hiroshi Ito, Takuya Kuwahara, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Seiji Samukawa, Momoji Kubo, “Atomistic Etching Mechanisms of SiO₂ Surface by Fluorocarbon Radicals: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation”, 2013 MRS Fall Meeting, December 1-6, 2013, Massachusetts, USA.</p> <p>227. 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, December 1-6, 2013, Massachusetts, USA.</p> <p>228. 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>229. 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>230. 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>231. 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>232. 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>233. 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>234. 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>235. Momoji Kubo, “First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design of Tribochemical Reaction”, HYDROGENIUS & I²CNER Joint</p>
--	---

Research Symposium(招待講演), January 31, 2014, Fukuoka, Japan.

236. 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, February 16-20, 2014, California, USA.

237. 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.

238. 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.

239. 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, France.

240. 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)

241. 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)

242. 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)

243. 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)

244. 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)

245. 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)

246. 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.

247. 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

248. 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 $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{H}$ 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

249. 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

250. 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

	<p>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>251. 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>252. 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>253. 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</p> <p>計 12 件</p>	<ol style="list-style-type: none"> 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/TiO₂ 触媒の反応解析に関する理論研究～CO₂ 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、31 (2011) 1-5. ISSN 1346-3675. 2. 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的设计」、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) 2-2. 3. 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. ISSN 1347-1767. 4. 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的设计」、化学工学、出版社: 化学工学会、76 (2012) 193-196. ISSN 0375-9253. 5. 尾澤伸樹、石川宗幸、中村美穂、久保百司、「CeO₂ 砥粒による Wet 環境下での SiO₂ 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、33 (2012) 351-356. ISSN 0388-5321. 6. 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エレクトロニクスシステムの電子・原子レベル設計」、パナソニック技報、出版社: パナソニック、58 (2012) 199-203. ISSN 1883-115X. 7. 尾澤伸樹、中村美穂、久保百司、「ガラス研磨の計算科学シミュレーション: 酸化セリウムに代わる代替砥粒の設計指針の提案」、精密工学会誌、出版社: 精密工学会、78 (2012) 941-946. ISSN 0912-0289. 8. 久保百司、「なじみ・焼付き」と量子化学、トライボロジスト、出版社: 日本トライボロジー学会、57 (2012) 779-779. ISSN 0915-1168. 9. 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ドライ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. 10. 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. 11. 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. 12. 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</p> <p>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 (URL)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 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 http://www.kubo.rift.mech.tohoku.ac.jp/NEXT/ 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。 2. 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 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 URL:http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html 内容:平成24年3月18日(日)に開催した市民講座の様子を広く国民に公開した。 3. ウェブページの題名: CAT-Vnet 東北大学市民講座 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 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 URL: http://cat-vnet.tv/movie/tu_2012_winter/001_01.html 内容:平成24年12月27日(木) に開催した市民講座の様子を広く国民に公開した 4. 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 http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html 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>	<ol style="list-style-type: none"> 1. 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」 実施日:平成24年3月18日(日) 場所:仙台国際センター 対象者:国民 参加者数:51名 内容:研究代表者は「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。 市民講座の案内と詳細は、ホームページ http://www.mech.tohoku.ac.jp/news/detail.php?cid=1&pid=393 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 (http://cat-vnet.tv/movie/tu_kikai/menu.html)。 2. 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」 実施日:平成24年12月27日(木) 場所:せんだいメディアテーク 対象者:国民 参加者数:70名 内容:研究代表者は「シミュレーションで実現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。さらに講演後、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。 市民講座の案内と詳細は、ホームページ http://www.rm.is.tohoku.ac.jp/next2012/ 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 (http://cat-vnet.tv/movie/tu_2012_winter/001_01.html)。 3. 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

	<p>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。</p> <p>市民講座の案内と詳細は、ホームページ http://www.pfsl.mech.tohoku.ac.jp/next2013/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 (http://cat-vnet.tv/movie/tu_2013_summer/001_01.html)。</p>
<p>新聞・一般雑誌等掲載 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」、TCC、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>
<p>その他</p>	<p>研究代表者の受賞</p> <p>1. 日本化学会学術賞、「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制御した機械システム的设计」、日本化学会、2013年3月23日</p> <p>論文雑誌の表紙</p> <p>英国王立化学会 (Royal Society of Chemistry) が発行する Faraday Discussions 誌 (インパクトファクター:5.0) の表紙に、本プロジェクトの成果である下記の論文の図が採用された。</p> <p>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", Faraday Discuss., 156 (2012) 137-146.</p> <p>上記論文雑誌の表紙絵は、下記のホームページに掲載されている。 http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/fd#!issueid=fd012156&type=current&issnprint=1359-6640</p> <p>論文雑誌の Hot Article</p> <p>英国王立化学会 (Royal Society of Chemistry) が発行する Faraday Discussions 誌 (インパクトファクター:5.0) の Hot Article に、本プロジェクトの成果である下記の論文が選ばれた。 (詳細は http://blogs.rsc.org/fd/2012/05/22/hot-articles-from-fd156-tribology/ に掲載されている)。</p> <p>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", Faraday Discuss., 156 (2012) 137-146.</p> <p>指導した学生の日本学術振興会特別研究員への採用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 白 珊瑚、日本学術振興会特別研究員 DC2、「超低摩擦を実現する量子論に基づくマルチスケールトライボケミカルシミュレータの開発」、平成25年度～平成26年度 2. 伊藤 寿、日本学術振興会特別研究員 DC1、「機械と量子化学の融合によるマルチフィジックス型 MEMS プロセスシミュレータの開発」、平成25年度～平成27年度 3. 桑原卓哉、日本学術振興会特別研究員 DC1、「高劣化耐久性・高効率太陽電池の実現に向けたマルチフィジックス計算化学手法の開発」、平成25年度～平成27年度 4. 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年度～平成27年度 <p>指導した学生の受賞</p> <ol style="list-style-type: none"> 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 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

	<p>扱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</p> <p>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</p> <p>4. Takuya Kuwahara, Best Poster Presenter Award, "Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Surface Reactions of SiH_x 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.</p> <p>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」、東北大学大学院工学研究科長、2012年3月21日</p> <p>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」、日本機械学会、2012年3月27日</p> <p>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」、東北大学大学院工学研究科バイオロボティクス専攻長、2012年3月27日</p> <p>8. 小林 顕、日本コンピュータ化学会奨学賞、「第一原理分子動力学法によるPEFC電解質の劣化プロセスシミュレーション」、日本コンピュータ化学会、2012年5月18日</p> <p>9. Ryota Sakanoi, "Computational Simulation on Fracture Properties of Gadolinium-Doped Ceria Electrolytes for Highly Durable Solid Oxide Fuel Cell", International Conference on Nanoscience and Nanotechnology 2012, Paris, France, July 23-27, 2012. (海外の国際会議での受賞)</p> <p>10. 桑原卓哉、工学研究科長賞、「量子分子動力学法による薄膜太陽電池の結晶成長メカニズムの解明と高耐久性太陽電池の設計」、東北大学大学院工学研究科長、2013年3月22日</p> <p>11. 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>12. 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>13. 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>本プロジェクトの経費で雇用した助教(研究専念教員)の昇進</p> <p>1. 本プロジェクトで雇用した樋口祐次助教(研究専念教員)が、その研究成果が高く評価され、東北大学の正規の助教に昇進した。昇進日:2012年8月1日。</p> <p>2. 本プロジェクトで雇用した石川岳志助教(研究専念教員)が、その研究成果が高く評価され、長崎大学の准教授に昇進した。昇進日:2013年2月1日。</p> <p>本プロジェクトの経費で雇用した助教(研究専念教員)の招待講演</p> <p>1. Takeshi Ishikawa, "Quantum Chemical Study for Condensed-Phase System Based on the Fragment Molecular Orbital Method: Applications to Geometry Optimization and Molecular Dynamics Simulation", JST International Symposium on Multi-Scale Simulation of Condensed-Phase Reacting System, May 10-12, 2012, Nagoya, Japan.</p> <p>2. Takeshi Ishikawa, "Quantum Chemical Study of Biomolecules Using Fragment Molecular Orbital Method: An Application to Prion Protein", Impacts of Supersaturation on Protein Science, June 18, 2012, Osaka, Japan.</p> <p>指導した助教の招待講演</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>指導した助教のプロジェクトへの採用</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</p>
--	--

様式21

	<p>樋口祐次、研究代表者、平成 25 年度～28 年度 「高分子の劣化と破壊：量子化学と統計物理の融合」 (樋口祐次は、平成 23 年 4 月 1 日から本プロジェクトの助教(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> <p>本プロジェクトの研究成果を基盤に、それを発展させた新規プロジェクトへの採用</p> <ol style="list-style-type: none">1. 日本学術振興会、科学研究費、基盤研究(A)(一般) 久保百司、研究代表者、平成 26 年度～平成 28 年度 「超低摩擦技術開発のための量子化学に基づく「なじみ」と「焼付き」の理論基盤の構築」
--	--

7. その他特記事項

該当なし