

**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24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 年度は第一原理分子動力学法に基づく「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、平成 23 年度は第一原理分子動力学法に基づく「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に成功した。そこで平成 24 年度は、①第一原理分子動力学法に基づく「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、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、③平成 23～24 年度に開発した3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、④トライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイにおけるマルチフィジックス現象の解明を目的とした。また、一般市民を対象とした市民講座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「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」が複雑に絡みあったマルチフィジックス現象を解明可能なマルチフィジックスシミュレータの開発に成功した。

②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法の開発、収束性の向上により、シミュレータの高速化を実現した。

③平成 23～24 年度に開発した3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

「応力と化学反応」に関してはポリエチレンの劣化現象、「衝撃と化学反応」に関してはナフィオンの劣化現象、「電位と化学反応」に関しては Li イオン電池の劣化現象に対してシミュレータを応用することで実験結果と全く同じ現象を再現できることを確認し、シミュレータが高い計算精度を有していることを実証した。

④トライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイ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ダイヤモンドライクカーボンと窒化炭素膜の摩擦現象の差異の解明、原子力発電で使用されるポリマーの結晶相とアモルファス相における劣化現象の差異の解明、燃料電池で使用されるナフィオンの劣化反応における水の役割の解明、ディスプレイにおける気相成長などを解明した。

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 24 年 12 月 27 日にせんだいメディアテークにて市民講座を主催し、「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」の題目で最新の成果を紹介した。市民講座を収録したビデオをインターネットテレビ CAT-V にアップロードし公開した(http://cat-vnet.tv/movie/tu_2012_winter/001_01.html)。

3. 研究発表等

<p>雑誌論文 計6件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計4件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 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 2. Shandan Bai, Tasuku Onodera, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, A. 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 3. 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 4. 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/ <p>(掲載済み一査読無し) 計0件 (未掲載) 計2件</p> <ol style="list-style-type: none"> 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, J. Phys. Chem. C, in press. ISSN 1932-7447. 2. 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, in press. ISSN 1932-7447.
<p>会議発表 計76件</p>	<p>専門家向け 計76件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 久保百司、「計算科学手法による CeO₂ 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 2. Muneyuki Ishikawa, Kentaro Kawaguchi, Miho Nakamura, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "First-Principles Study on Chemical Reaction in CMP Process of Glass Surface by CeO₂ Particle", International Association of Colloid and Interface Scientists 2012, May 13-18, 2012, Sendai, Japan. 3. 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. 4. 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. 5. 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 6. 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 7. 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 8. 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>9. 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>10. 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>11. 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>12. 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>13. 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>14. 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>15. 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>16. 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>17. 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>18. Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, “Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Silicon Chemical Vapor Deposition Process for Solar Cells”, International Conference on Nanoscience and Nanotechnology 2012, July 23-27, 2012, Paris, France.</p> <p>19. 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>20. 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>21. 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>22. 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>23. 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>24. 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>25. 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>26. 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>27. 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>28. 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>29. 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>30. 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>31. 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>32. 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>33. 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>34. 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>35. 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>36. Kang Zhou, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, Momoji Kubo, "Molecular Dynamics Study on Recycling Mechanism of Used CeO_2 Abrasive Grain for CMP of Glass Surface", The Ninth International Conference on Flow Dynamics, September 19-21, 2012, Sendai, Japan.</p> <p>37. 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>38. 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>39. 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 SiO_2 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>40. 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>41. 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>42. 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>43. 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>44. 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>
--	---

45. 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
46. 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.
47. 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.
48. Seiichiro Sato, Shandan Bai, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Tomomi Shimazaki, 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.
49. 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.
50. 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.
51. 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」、ナノブローテクノロジー第 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
52. 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.
53. 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.
54. 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.
55. 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.
56. 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.
57. 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.
58. 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.
59. 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.
60. Yuji Higuchi, Takeshi Ishikawa, Nobuki Ozawa, Laurent Chazneau, 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)
61. 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>62. Akira Kobayashi, Takeshi Ishikawa, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “First-Principles 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>63. 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>64. 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>65. 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>66. 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>67. 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>68. 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>69. 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>70. 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>71. 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>72. 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>73. 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>74. 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>75. 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>76. 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>一般向け 計0件</p>
<p>図書 計6件</p>	<p>(掲載済み) 計4件</p> <p>1. 尾澤伸樹、石川宗幸、中村美穂、久保百司、「CeO_2 砥粒による Wet 環境下での SiO_2 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.</p> <p>2. 久保百司、「量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と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.</p> <p>3. 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.</p>

様式19 別紙1

	<p>4. 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. (未掲載) 計2件</p> <p>1. 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、in press. ISSN 0915-1168.</p> <p>2. 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、in press. ISSN 1347-1767.</p>
<p>産業財産権 出願・取得状況 計0件</p>	<p>(取得済み) 計0件 (出願中) 計0件</p>
<p>Webページ (URL)</p>	<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 URL: 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た。</p> <p>2. 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。</p>
<p>国民との科学・技術対話の実施状況</p>	<p>標題：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る質問に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)。</p>
<p>新聞・一般雑誌等掲載 計0件</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の設計」、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。 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, <i>Faraday Discuss.</i>, 156 (2012) 137-146. 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：</p>

	<p>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)。 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 (同時に3名の採用)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 白 珊丹、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 <p>指導した学生の受賞</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 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 2. 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) 3. 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>研究代表者が指導した助教(研究専念教員)の招待講演</p> <p>本プロジェクトで雇用した石川岳志助教(研究専念教員)が国際会議で2件の招待講演を行った。</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. 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>研究代表者が指導した助教(研究専念教員)の昇進</p> <p>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。</p>
--	---

4. その他特記事項

該当なし。

実施状況報告書(平成24年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されず

1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (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	33,680,000	33,330,000	32,990,000	0
間接経費	30,000,000	10,104,000	9,999,000	9,897,000	0
合計	130,000,000	43,784,000	43,329,000	42,887,000	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	1,261,083	33,330,000	0	34,591,083	33,482,315	1,108,768	0
間接経費	0	9,999,000	0	9,999,000	9,999,000	0	0
合計	1,261,083	43,329,000	0	44,590,083	43,481,315	1,108,768	0

3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	8,891,067	大容量メモリコンピュータサーバ等
旅費	8,917,817	研究成果発表旅費(MRS2012秋国際会議)等
謝金・人件費等	13,814,895	助教(研究専念教員)人件費等
その他	1,858,536	市民講座開催費、投稿論文の英語校正料等
直接経費計	33,482,315	
間接経費計	9,999,000	
合計	43,481,315	

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
大容量メモリ コンピュータサーバ	HPCテクノロジーズ機製 HPC-ProServerDP-T5600	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テクノロジーズ機製 DP-T5600	2	630,000	1,260,000	2013/3/18	東北大学