

令和 6 年 9 月 24 日現在

機関番号：24506

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05718

研究課題名（和文）計算科学による水圏機能材料の設計

研究課題名（英文）Design of Aquatic Functional Materials Based on Computational Science

研究代表者

鷲津 仁志（Washizu, Hitoshi）

兵庫県立大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：00394883

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 101,000,000円

研究成果の概要（和文）：水圏機能材料の多くは自己組織化（液晶化、ホスト-ゲスト反応など）して秩序構造を形成する。その際、材料分子側は水分子の強い極性に誘起され、凝縮相特有の部分電荷の再配置（分極）が生じる。この部分電荷を量子化学的に精密に決定するマルチフィジックス的手法を提案・活用して、たとえばイオン液晶膜の構造予測および材料中の水の状態についての解析に成功した。さらに、生体親和性高分子中の水分子の赤外吸収スペクトルの比定など、従来は低分子溶液でしか対比できなかった分光データとの直接比較を実現するスキームを提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

イオン液晶中の水において、水素結合状態の異なる4種類の水が分類できることがわかった。この知見は、従来のバルクにおける水和の概念を拡張させる必要性を示した。高分子近傍における水分子は、熱量測定に基づく不凍水、中間水、自由水の概念が提案されていたが、高分子主鎖あるいは官能基からの距離で分類した配向因子の解析においても類似の定義が可能であることを示した。また、水と水圏機能材料の直接の相互作用だけではなく、その周囲の水分子間の水素結合ネットワークが水のダイナミクスに重要であることも見出した。「負の水和状態」と呼ばれる分子スケールにおける描像を明らかにし、高分子周囲の水の動態の理解にも適用した。

研究成果の概要（英文）：Many of the aquatic functional materials self-organize (liquid crystallization, host-guest reactions, etc.) to form ordered structures. The material molecule side is induced by the strong polarizability of the water molecules, and rearrangement (polarization) of partial charges peculiar to the condensed phase occurs. By proposing and utilizing a multiphysics method to precisely determine this partial charge using quantum chemistry, we succeeded in predicting the structure of ionic liquid crystal films and analyzing the state of water in materials, for example. Furthermore, we proposed a scheme that enables direct comparison with spectroscopic data, such as the determination of infrared absorption spectra of water molecules in biocompatible polymers, which could previously only be compared with small molecule solutions.

研究分野：物理化学

キーワード：水圏機能材料 分子シミュレーション 固液界面 マルチスケール 高分子 液晶 水和 自由エネルギー

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

水を利用した材料設計のためには、水の動態の解明が必要不可欠であり、そのためには**分子シミュレーションが有効**である。水に関する研究として、量子化学計算から分子動力学法まで幅広い手法により、相図の作成や水の動態の解明が進んでいる。また、ナノメートルレベルの拘束空間での水の特異な振る舞いにも注目が集まっている。これらの研究では**界面水や水そのものの物性にのみ焦点**が当てられている。**水が分子の構造制御に重要**であることは、材料においては考慮されておらず、**分子論的な理解は進んでいない**。すなわち、水圏において材料は、水やイオンを含む**階層的な構造により機能発現**するが、水(オングストローム)から材料のマクロ(ミリメートル)な構造までつなげることのできる**適切な分子シミュレーション手法が確立できていない**ために、水が水圏における材料設計・構築において果たす役割を解明できていない。

2. 研究の目的

本研究課題では、材料における**量子・原子レベル、粗視化分子、流動中の粒子**の各階層における**水圏シミュレーション**手法を創出・融合し、分子機構解析により水圏機能材料を創製するための分子設計指針を提示することを目的とした。**分子集合体・イオン溶液の分子シミュレーション**を核に、**液晶薄膜・高分子**のシミュレーション技術を組み合わせ、実験解析で得られた知見との相補的な現象理解に基づく**水圏機能融合材料の構造・機能を解明**し、その**設計指針**の確立を進めた。

3. 研究の方法

水圏機能材料の設計指針を提示するために、量子・原子レベルから材料全体レベルまでの水・イオン・有機材料・高分子材料を主として対象としたマルチスケールのシミュレーション技術を確立することで、分子理論に基づく水圏機能材料の基礎学理を構築する研究を行った。具体的には以下の三点を重点的に取り組んだ。

「**つなぐ(界面接続)**」 分子集合体中の水の透過、水圏材料の構造・自己組織化、水圏・非水圏界面の水の動態の解明と、電子・イオン機能材料の制御・設計指針の確立

「**はたらく(融合機能発現)**」 生体親和性高分子と水の相関関係、安定性、分子認識機能の解明と、バイオ・環境機能材料の制御・設計指針の確立

「**つくる(水環境合成)**」 水圏における結晶化過程、高分子の接着プロセスの解明と、メカノ機能材料の制御・設計指針の確立

4. 研究成果

「つなぐ(界面接続)」

イオン機能液晶膜の新規量子・分子連成法によるシミュレーションを実施し、水の自由エネルギー状態の解析を行った。ジャイロイド型とカラムナー型構造の再現に成功し、自己組織化した水圏機能材料中の**水の構造・水の透過プロセスを解明**した(図1)。粗視化シミュレーションを用いて、水圏ペプチド分子の自己組織化プロセスを明らかにした(図2)。さらに、アルキル基とフルオロアルキル基を導入した二種類の分子の混合・分離度が、疎水部の長さ依存した温度応答性を示すことを解明した。**単分子膜**において、タンパク質吸着プロセスの全原子シミュレーション

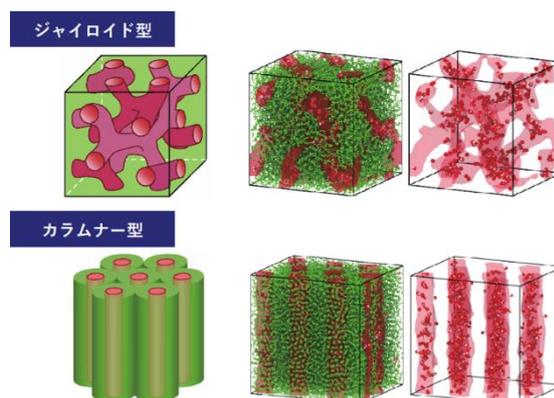


図1. イオン液晶膜の分子動力学

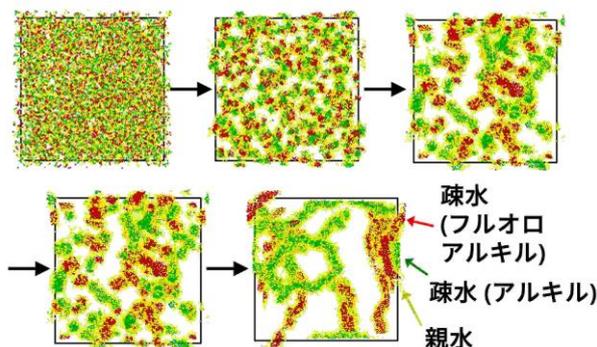


図 2. 水圏ペプチド分子の自己組織化シミュレーション



図 3. 単分子膜へのタンパク質吸着シミュレーション

ンを行った。タンパク質が吸着した際の膜構
らかにした(図 3)。こ
て、水の構造・動態も
解明しており、水の
学理構築にも貢献し
た。

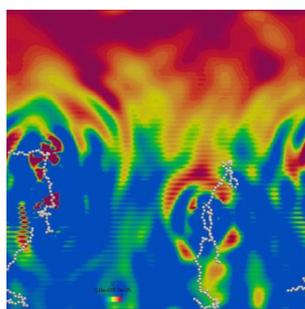


図 X. 流体-ブラウン運動シミュレーションによる高分子周囲の流動速度場

「はたらく(融合機能発現)」

生体親和性高分子の構造の安定性を明らかにするために全安定性に対して、高
を計算科学の立場から示した(図 4)。また、全原子シミュレーションにより、超分子ヒドロゲルの錯体形成に関する分子描像の詳細を明らかにした。これら成果で得られたメカニズムに基づき、バイオ・環境機能材料の制御・設計指針を提案した。

「つくる(水環境合成)」

高分子接着系について、密度汎関数法を用いて、側鎖の電荷と接着強度に関する知見を得た。ホスト-ゲストゲルに対して、密度汎関数法とイオン溶液に関する理論的考察により、イオン濃度と接着強度に関する知見を得た。電子ドナー・アクセプター・ドナー-連結型の発光分子が水中に形成する自己集合構造において、異なる 2 種類の配座が共存することを明らかにした。これらの知見から、材料の制御・設計指針を示した。

分子シミュレーション技術の確立

水圏機能材料の多くは自己組織化(液晶化、ホスト-ゲスト反応など)して秩序構造を形成する。その際、材料分子側は水分子の強い極性に誘起され、凝縮相特有の部分電荷の再配置(分極)が生じる。この部分電荷を量子化学的に精密に決定するマルチフィジックス的手法を提案・活用して、たとえばイオン液晶膜の構造予測および材料中の水の状態についての解析に成功した [鷺津 *Sci. Adv.*, 2021, *J. Phys. Chem. B* 2022]。さらに、生体親和性高分子中の水分子の赤外吸収スペクトルの比定など、従来は低分子溶液でしか対比できなかった分光データとの直接比較を実現する計算スキームを提案した [鷺津 *J. Phys. Chem. B*, 2022]。

また、溶液中の材料を退いて観ると、溶媒である水は誘電率や粘性で特徴づけられる流動場として、溶質である材料はブラウン粒子として表現される。このマルチスケール流体としての材料モデリ

ク質

造変化、および界面近傍の水分子の動態を明
れら成果は水圏機能材料の構造・物性に加え

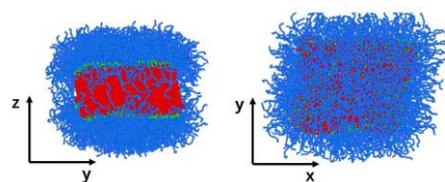


図 4. 粗視化シミュレーションを用いた生体親和性高分子の安定性の評価

原子・粗視化シミュレーションを実施した。
分子の結晶性やコアとなる骨格部の重要性

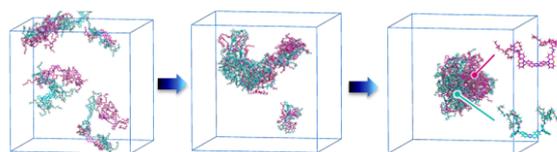


図 5. 全原子シミュレーションによる電子D-A-D連結型発光分子の自己集合構造解明

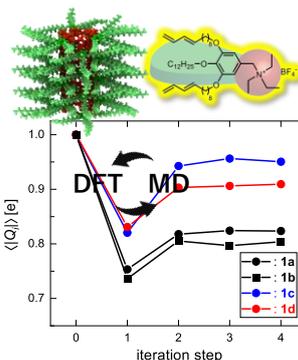


図 X. マルチフィジックス電荷決定法

ングは、材料設計や生体分子の理解に必須であったにも関わらず、機械工学と分子科学の境界領域であるため適切なシミュレーション手法を開発できなかった。我々は、格子ボルツマン法とランジュバン動力学を組み合わせた新規シミュレータを開発し、とくに流れの遅い流動場において溶質のブラウン運動に起因する複雑流動場が形成されること、それが溶質分子の自己集合やタンパク質のフォールディングといった分子機能発現に決定的に重要であることを示した [鷺津 *J. Nonnewton. Fluid Mech.* 2024, *J. Mol. Liq.* 2024]。

さらに、粗視化粒子シミュレーション手法を進展させ、流体中の分子凝集プロセスを定量化した。ソフトマター材料の大規模粗視化シミュレーション技術を発展させることで、高分子の構造の安定性評価や水の吸着・吸水プロセスを解明した。

分子シミュレーションで得られた結果に対する解釈においても、新規手法を提案した。溶液系の基本的な解析手法である動径分布関数は、高分子のような長距離秩序のある系に用いても短距離構造しか捉えることができないため、新たにパーシステントホモロジーに基づく構造解析法を高分子溶融体の分子動力学に適用し、高分子材料としてはじめて分子構造の違いによる誘電特性の違いを明らかにした [鷺津 *Sci. Rep.* 2021]。この手法は、マテリアルズインフォマティクスの説明変数として用いることができる。

これら分子シミュレーション技術を用いることで、「つなぐ」、「はたらく」、「つくる」の研究に取り組んだ。

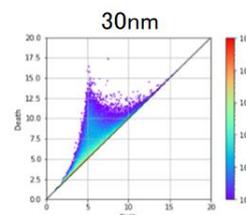


図 X. パーシステントホモロジーによる高分子構造解析

水の学理構築

イオン液晶中の水において、水素結合状態の異なる 4 種類の水が分類できることがわかった。これらは、疎水基中、チャンネル中において孤立、官能基に結合、他の水分子と結合であるが、チャンネル中の水の分量によって、それぞれの自由エネルギーに基づく安定性が異なり、クラスター数や拡散性が変化する。この知見は、従来のバルクにおける水和の概念を拡張させる必要性を示した。高分子近傍における水分子は、熱量測定に基づく不凍水、中間水、自由水、自由水の概念が提案されていたが、高分子主鎖あるいは官能基からの距離で分類した配向因子の解析においても類似の定義が可能であることを示した [鷺津 *PCCP* 2022, *PCCP* 2022]。また、水と水圏機能材料の直接の相互作用（第一水和圏）だけではなく、その周囲（第二水和圏）の水分子間の水素結合ネットワークが水のダイナミクスに重要であることも見出した。水と材料の引力が強すぎると、その周囲の水素結合ネットワークが壊され、水の回転運動が加速される「負の水和状態」の分子スケールにおける描像を明らかにした。さらに、材料周囲の水の回転緩和の説明変数として規格化した水素結合数を提唱した。得られたメカニズムを高分子周囲の水の動態の理解にも適用した。

計画研究、公募研究との共同研究

渡辺は、**原(A01 公募)**の GI-XRD を駆使した実験に対して、新奇ならせん構造を有する**カラムナー液晶の配向構造**、そしてらせん**構造形成のメカニズム**を分子動力学により**解明**した(渡辺 *Chem. Commun.* 2020)。相良(A03 公募)のロタキサン型超分子メカノフォアにおいて軸分子末端のストッパーサイズと包接-解離状態間の自由エネルギー差の関係を全原子シミュレーションで明らかにした(渡辺 *J. Mater. Chem. C* 2023)。

A01-1 加藤のイオン機能液晶について、A02-1 池本らの IR スペクトルのデータを A02 鳥居の量子化学計算を援用し説明し得ることを示した。この結果をさらに A03-2 田中 生体適合性材料に応用した。

A02-1 原田らの固体表面に担持された水溶性高分子について水和状態の解析を論文発表し、さらに生体高分子系に応用し論文化した。

ホスト-ゲスト系に関する応用を進め、A03-3 高島と包接プロセスの分子シミュレーションモデルを提示し、高分子ゲルやガスセンサーに適用した。

A02 金らと液晶の相転移について新規シミュレーション手法を提案した。

A01-1 加藤らと液晶の複雑相構造の再現に成功した。

A01 根岸の COF 材料について水の浸透性の新規機構モデルを提示した。

A01 仁科らの酸化グラフェンの摩擦モデルを提案した。

A03 藤田のイオン液体中の水和について明らかにした。

A01-1 加藤が設計した、生体分子認識能を持つ液晶分子で構成された水面上単分子膜の MD シミュレーションを行い、水中のタンパク質が吸着したときの膜構造変化や周囲の水分子のダイナミクスについて明らかにした。

A01 芹澤が提案したセルロースが逆平行配列した結晶性集合体においては、セルロース分子の側鎖アルキル基の違いが生体分子吸着に与える影響、吸着した生体分子の構造変化、さらには吸着現象に関わる分子間の相互作用エネルギーを明らかにした。

水中においてシクロデキストリンとジカチオン性ビオロゲンが側鎖に導入された超分子ヒドロゲルにおける包接錯体での相互作用エネルギー(A03-3 高島ら)を評価した。

A01 中村が開発した、水圏で機能するアミドシクロデキストリン型有機アニオンレセプターについて、MD シミュレーションを用いた自由エネルギー解析によって分子認識機構や水分子の作用機序に関する重要な知見を得た。

A03 公募相良との共同研究では、ロタキサン型超分子メカノフォアの分子設計指針を MD シミュレーションによって得られることを示した。

A03 公募相良の提案した研削加工によって得られるメカノクロミック発光性超分子ファイバーにおいて、集合構造の詳細を全原子 MD シミュレーションによって明らかにした。

A01-2 武田らとの共同研究においては、電子ドナー・アクセプター・ドナー連結型の発光分子が水中において形成する自己集合構造を再現し、2 種類のコンフォーマーが安定して共存することを明らかにした。

A01 公募堀内の 1 次元水チャンネルを有する有機無機複合体の細孔性結晶において、A02-1 原田・池本らと細孔内部における水分子の動態解析に取り組んだ。

両親媒性のリン脂質分子が形成する二重膜上の水の動態を解明するために、A02-1 菱田と連携して水の回転拡散挙動を明らかにした。

A02-1 菱田と A03-2 田中賢と連携し、15 種類の低分子に対して、水溶液中の水分子の回転緩和を測定した。規格化した水素結合数と、様々な低分子周囲の水の回転緩和は正の相関を示した。

A02-1 瀬戸の中性子散乱測定で観察されているリン脂質分子と水分子のダイナミクスを詳細に解析した。リン脂質親水部の並進、回転緩和挙動を明らかにすることで、実験結果を説明した。

原子スケールにおける A03-3 高島のホスト-ゲスト分子や、A01-2 福島の高分子の相互作用に関するメカニズムを明らかにし、材料設計へ役立てた。

A01 公募若林の両親媒性ペプチドの自己組織化プロセスを明らかにするために粗視化シミュレーションを行い、温度応答性を解明した。

A01-2 福島、A01-1 加藤、A03-2 田中賢と連携して、両親媒性高分子の安定構造において、高分子の結晶性やコアとなる骨格部の重要性を示した。

A03-3 松葉、A02-1 池本と連携して、結晶性高分子への水分子の吸着・吸水プロセスを解明した。

以上のように、**材料の構造・物性に関する知見に基づく制御・設計指針の提示、水の動態の解明による水の学理構築、分子シミュレーション技術の発展**と、当初の予想を上回るペースで成果が上がっている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計70件（うち査読付論文 64件 / うち国際共著 5件 / うちオープンアクセス 17件）

1. 著者名 Tomoya Enjou, Shimpei Goto, Qiming Liu, Fumitaka Ishiwari, Akinori Saeki, Taro Uematsu, Yuka Ikemoto, Sora Watanabe, Go Matsuba, Kouichiro Ishibashi, Go Watanabe, Satoshi Minakata, Yoshimitsu Sagara, Youhei Takeda	4. 巻 60
2. 論文標題 Water-Dispersible Donor_Acceptor_Donor -Conjugated Bolaamphiphiles Enabling a Humidity-Responsive Luminescence Color Change	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 3653-3656
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CC05749F	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Qiming Liu, Tianyue Zhang, Yuka Ikemoto, Yudai Shinozaki, Go Watanabe, Yuta Hori, Yasuteru Shigeta, Takemi Midorikawa, Koji Harano, Yoshimitsu Sagara	4. 巻 -
2. 論文標題 Grinding-Induced Water Solubility Exhibited by Mechanochromic Luminescent Supramolecular Fibers	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Small	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/smll.202400063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 渡辺 豪	4. 巻 34
2. 論文標題 ソフトマテリアルにおける全原子分子動力学シミュレーション	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会誌	6. 最初と最後の頁 236-242
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Kato, Junya Uchida, Yoshiki Ishii, Go Watanabe	4. 巻 11
2. 論文標題 Aquatic Functional Liquid Crystals: Design, Functionalization, and Molecular Simulation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Adv. Sci.	6. 最初と最後の頁 2306529
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/advs.202306529	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Craig P. Yu, Shohei Kumagai, Michitsuna Tsutsumi, Tadanori Kurosawa, Hiroyuki Ishii, Go Watanabe, Daisuke Hashizume, Hiroki Sugiura, Yukio Tani, Toshihiro Ise, Tetsuya Watanabe, Hiroyasu Sato, Jun Takeya, Toshihiro Okamoto	4. 巻 10
2. 論文標題 Asymmetrically Functionalized Electron-Deficient π -Conjugated System for Printed Single-Crystalline Organic Electronics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Adv. Sci.	6. 最初と最後の頁 2207440
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/advs.202207440	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 佐藤 俊輔, 渡辺 豪	4. 巻 72
2. 論文標題 計算化学によるソフトマテリアルの分子描像解明	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 高分子	6. 最初と最後の頁 448-450
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Go Watanabe, Akane Yamazaki, Jun Yoshida	4. 巻 15
2. 論文標題 The Missing Relationship between the Miscibility of Chiral Dopants and the Microscopic Dynamics of Solvent Liquid Crystals: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Symmetry	6. 最初と最後の頁 1092
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/sym15051092	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuji Higuchi	4. 巻 298
2. 論文標題 Absorption of Water Molecules on the Surface of Stereocomplex-Crystal Spherulites of Polylactides: An In-situ FT-IR Spectroscopy Investigation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 J. Polymer	6. 最初と最後の頁 126922
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.polymer.2024.126922	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Dimitrios G Tsalikis, Mihai Ciobanu, Costas S Patrickios, Yuji Higuchi	4. 巻 56
2. 論文標題 Model Amphiphilic Polymer Conetworks in the Bulk: Dissipative Particle Dynamics Simulations of Their Self-Assembly and Mechanical Properties	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 9299-9311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.3c01392	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hiroaki Ito, Naofumi Shimokawa, Yuji Higuchi	4. 巻 127
2. 論文標題 Lateral Transport of Domains in Anionic Lipid Bilayer Membranes under DC Electric Fields: A Coarse-Grained Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. B	6. 最初と最後の頁 8860-8868
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c04351	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takayuki Ota, Valentina Montagna, Yuji Higuchi, Takashi Kato, Masaru Tanaka, Haritz Sardon, Kazuki Fukushima	4. 巻 13
2. 論文標題 Organocatalyzed Ring-Opening Reactions of α -Carbonyl-Substituted ϵ -Caprolactones	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 RSC Adv.	6. 最初と最後の頁 27764-27771
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3ra01025b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Md. Khalidur Rahman, Takeshi Yamada, Norifumi L. Yamada, Mafumi Hishida, Yuji Higuchi, Hideki Seto	4. 巻 10
2. 論文標題 Quasi-elastic Neutron Scattering Reveals the Relationship between the Dynamical Behavior of Phospholipid Headgroups and Hydration Water	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Struct. Dyn.	6. 最初と最後の頁 44701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/4.0000184	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuji Higuchi, Klemen Bohinc, Jurij Režič, Naofumi Shimokawa, Hiroaki Ito	4. 巻 19
2. 論文標題 Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Cation Distribution Profiles on Negatively Charged Lipid Membranes During Phase Separation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 3640-3651
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3SM00222E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kosar Khajeh, Deboprasad Talukdar, Gentaro Sawai, Hitoshi Washizu	4. 巻 325
2. 論文標題 A multiscale framework for polymer modeling applied in a complex fluid flow	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 J. Nonnewton. Fluid Mech.	6. 最初と最後の頁 105200
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jnnfm.2024.105200	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroaki Koshima, Ai Hamano, Hiroshi Tokairin, Yuko Murakami, Hitoshi Washizu	4. 巻 19
2. 論文標題 Experimental and Theoretical Study on the Tribological Characteristics of Organophosphates on Metal Surfaces	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Tribol. Online	6. 最初と最後の頁 45618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2474/trol.19.11	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kosar Khajeh, Deboprasad Talukdar, Shuhei Yamamoto, Sota Endo, Kazunori Kamio, Hitoshi Washizu	4. 巻 393
2. 論文標題 A comparative study of polymer viscosity modifiers: Flow field challenges & alternative trends	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 J. Mol. Liq.	6. 最初と最後の頁 123590
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molliq.2023.123590	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Junsu Park, Yui Sasaki, Yoshiki Ishii, Shunsuke Murayama, Kohei Ohshiro, Kengo Nishiura, Ryohei Ikura, Hiroyasu Yamaguchi, Akira Harada, Go Matsuba, Hitoshi Washizu, Tsuyoshi Minami, and Yoshinori Takashima	4. 巻 15
2. 論文標題 Leaf-Inspired Host-Guest Complexation-Dictating Supramolecular Gas Sensors	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 39777-39785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.3c04395	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 26
2. 論文標題 ニューラルネットワークポテンシャルと反応力場によるトライボ界面反応の解析	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 34-38
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11436/mssj.26.34	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 46
2. 論文標題 高分子のトライボ分子シミュレーション	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 bmt (ベアリング&モーション・テック)	6. 最初と最後の頁 32-34
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 74
2. 論文標題 風力発電機の軸受・増速機の潤滑シミュレーション	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 表面技術	6. 最初と最後の頁 45516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4139/sfj.74.430	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 37
2. 論文標題 トライボ化学反応の分子動力学解析 -計算手法とツールを中心に-	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 月刊トライボロジー	6. 最初と最後の頁 32-35
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawashima Yusuke, Hamachi Tomoyuki, Yamauchi Akio, Nishimura Koki, Nakashima Yuma, Fujiwara Saiya, Kimizuka Nobuo, Ryu Tomohiro, Tamura Tetsu, Saigo Masaki, Onda Ken, Sato Shunsuke, Kobori Yasuhiro, Tateishi Kenichiro, Uesaka Tomohiro, Watanabe Go, Miyata Kiyoshi, Yanai Nobuhiro	4. 巻 14
2. 論文標題 Singlet fission as a polarized spin generator for dynamic nuclear polarization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1056-1/12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-36698-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hiratsuka Keiko, Muramatsu Tatsuya, Seki Takuya, Weder Christoph, Watanabe Go, Sagara Yoshimitsu	4. 巻 11
2. 論文標題 Tuning the mechanoresponsive luminescence of rotaxane mechanophores by varying the stopper size	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3949 ~ 3955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3tc00330b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hamaguchi Kazuma, Lu Huanjun, Okamura Shota, Kajiyama Satoshi, Uchida Junya, Sato Shunsuke, Watanabe Go, Ishii Yoshiki, Washizu Hitoshi, Ungar Goran, Kato Takashi	4. 巻 24
2. 論文標題 Reentrant 2D Nanostructured Liquid Crystals by Competition between Molecular Packing and Conformation: Potential Design for Multistep Switching of Ionic Conductivity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.202200927	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Serizawa Takeshi, Yamaguchi Saeko, Amitani Moe, Ishii Sawa, Tsuyuki Hiromi, Tanaka Yukiko, Sawada Toshiki, Kawamura Izuru, Watanabe Go, Tanaka Masaru	4. 巻 220
2. 論文標題 Alkyl chain length-dependent protein nonadsorption and adsorption properties of crystalline alkyl -celluloside assemblies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Colloids and Surfaces B: Biointerfaces	6. 最初と最後の頁 112898 ~ 112898
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.colsurfb.2022.112898	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Katsukawa Ryoichi, Van Sang Le, Tomiyama Eiji, Washizu Hitoshi	4. 巻 70
2. 論文標題 High-Pressure Lubrication of Polyethylene by Molecular Dynamics Approach	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Tribology Letters	6. 最初と最後の頁 101-1/9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11249-022-01638-8	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Le Tue Minh Nhu, Washizu Hitoshi	4. 巻 24
2. 論文標題 The effect of electric field on the structural order of water molecules around chitosan between nano gold plates determined by molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 30035 ~ 30043
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp03916h	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Yoshiki, Matubayasi Nobuyuki, Washizu Hitoshi	4. 巻 126
2. 論文標題 Nonpolarizable Force Fields through the Self-Consistent Modeling Scheme with MD and DFT Methods: From Ionic Liquids to Self-Assembled Ionic Liquid Crystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4611 ~ 4622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c02782	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikemoto Yuka, Harada Yoshihisa, Tanaka Masaru, Nishimura Shin-nosuke, Murakami Daiki, Kurahashi Naoya, Moriwaki Taro, Yamazoe Kosuke, Washizu Hitoshi, Ishii Yoshiki, Torii Hajime	4. 巻 126
2. 論文標題 Infrared Spectra and Hydrogen-Bond Configurations of Water Molecules at the Interface of Water-Insoluble Polymers under Humidified Conditions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4143 ~ 4151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawai Yusaku, Park Junsu, Ishii Yoshiki, Urakawa Osamu, Murayama Shunsuke, Ikura Ryohei, Osaki Motofumi, Ikemoto Yuka, Yamaguchi Hiroyasu, Harada Akira, Inoue Tadashi, Washizu Hitoshi, Matsuba Go, Takashima Yoshinori	4. 巻 14
2. 論文標題 Preparation of dual-cross network polymers by the knitting method and evaluation of their mechanical properties	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 NPG Asia Materials	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41427-021-00348-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 鷲津仁志	4. 巻 67
2. 論文標題 トライボロジー分野におけるデータ科学の活用と今後の展望	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 815-820
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 石井良樹	4. 巻 24
2. 論文標題 自己組織化イオン液晶が形成するナノ界面のモデリングと水分子のダイナミクス	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 152-159
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Le Van Sang, Sugimura Natsuko, Khajeh Kosar, Washizu Hitoshi	4. 巻 38
2. 論文標題 Solid Lubricants of Combined Graphene and Iron Nanoparticles for Study of Friction and Stability	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 1860 ~ 1868
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c03075	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takemoto Kengo, Ishii Yoshiki, Washizu Hitoshi, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 156
2. 論文標題 Simulating the nematic-isotropic phase transition of liquid crystal model via generalized replica-exchange method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 014901 ~ 014901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0073105	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Le Tue Minh Nhu, Van Sang Le, Washizu Hitoshi	4. 巻 24
2. 論文標題 Structural order of water molecules around polyrotaxane including PEG, -cyclodextrin, and -lipoic acid linker on gold surface by molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 2176 ~ 2184
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP04487G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Van Sang Le, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 165
2. 論文標題 Graphene as solid lubricant vertically buried into iron contact surface by annealing for superlubricity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Tribology International	6. 最初と最後の頁 107288 ~ 107288
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.triboint.2021.107288	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Yoshiki, Matubayasi Nobuyuki, Watanabe Go, Kato Takashi, Washizu Hitoshi	4. 巻 7
2. 論文標題 Molecular insights on confined water in the nanochannels of self-assembled ionic liquid crystal	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.abf0669	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津仁志	4. 巻 23
2. 論文標題 分子シミュレーションによる高分子電解質溶液の構造およびダイナミクス	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 113-120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Osaka Ai I., Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 144
2. 論文標題 Smoothed Particle Hydrodynamics and Discrete Element Method Coupling for Influence of Hexagonal Boron Nitride Lubricant Particle on Friction of Elastic Coarse-Grained Micronscale Iron	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4050711	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 66
2. 論文標題 分子シミュレーションで解明されたトライボ現象	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 258 ~ 266
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18914/tribologist.66.04_258	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Shohei, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Yu Craig P., Watanabe Shun, Takeya Jun, Okamoto Toshihiro	4. 巻 55
2. 論文標題 Nitrogen-Containing Perylene Diimides: Molecular Design, Robust Aggregated Structures, and Advances in n-Type Organic Semiconductors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Accounts of Chemical Research	6. 最初と最後の頁 660 ~ 672
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.accounts.1c00548	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fukushima Kazuki, Matsuzaki Kodai, Oji Masashi, Higuchi Yuji, Watanabe Go, Suzuki Yuki, Kikuchi Moriya, Fujimura Nozomi, Shimokawa Naofumi, Ito Hiroaki, Kato Takashi, Kawaguchi Seigou, Tanaka Masaru	4. 巻 55
2. 論文標題 Anisotropic, Degradable Polymer Assemblies Driven by a Rigid Hydrogen-Bonding Motif That Induce Shape-Specific Cell Responses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 15 ~ 25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.1c01894	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yaguchi Atsuya, Oshikawa Mio, Watanabe Go, Hiramatsu Hirotsugu, Uchida Noriyuki, Hara Chikako, Kaneko Naoko, Sawamoto Kazunobu, Muraoka Takahiro, Ajioka Itsuki	4. 巻 12
2. 論文標題 Efficient protein incorporation and release by a jigsaw-shaped self-assembling peptide hydrogel for injured brain regeneration	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-26896-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ueda Chiharu, Park Junsu, Hirose Kazuya, Konishi Subaru, Ikemoto Yuka, Osaki Motofumi, Yamaguchi Hiroyasu, Harada Akira, Tanaka Masaru, Watanabe Go, Takashima Yoshinori	4. 巻 1
2. 論文標題 Behavior of supramolecular cross-links formed by host-guest interactions in hydrogels responding to water contents	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Supramolecular Materials	6. 最初と最後の頁 100001 ~ 100001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.supmat.2021.100001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yu Craig P., Kojima Naoya, Kumagai Shohei, Kurosawa Tadanori, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Takeya Jun, Okamoto Toshihiro	4. 巻 4
2. 論文標題 Approaching isotropic charge transport of n-type organic semiconductors with bulky substituents	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-021-00583-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wakabayashi Rie, Imatani Rino, Katsuya Mitsuhiro, Higuchi Yuji, Noguchi Hiroshi, Kamiya Noriho, Goto Masahiro	4. 巻 58
2. 論文標題 Hydrophobic immiscibility controls self-sorting or co-assembly of peptide amphiphiles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 585 ~ 588
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CC05560G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Guo Jingyu, Ito Hiroaki, Higuchi Yuji, Bohinc Klemen, Shimokawa Naofumi, Takagi Masahiro	4. 巻 37
2. 論文標題 Three-Phase Coexistence in Binary Charged Lipid Membranes in a Hypotonic Solution	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 9683 ~ 9693
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c00967	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Higuchi Yuji, Asano Yuta, Kuwahara Takuya, Hishida Mafumi	4. 巻 37
2. 論文標題 Rotational Dynamics of Water at the Phospholipid Bilayer Depending on the Head Groups Studied by Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 5329 ~ 5338
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c00417	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Higuchi Yuji	4. 巻 103
2. 論文標題 Coarse-grained molecular dynamics simulations of void generation and growth processes in the fracture of the lamellar structure of polyethylene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.103.042502	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Osaka Ai I., Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 144
2. 論文標題 Smoothed Particle Hydrodynamics and Discrete Element Method Coupling for Influence of Hexagonal Boron Nitride Lubricant Particle on Friction of Elastic Coarse-Grained Micronscale Iron	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 11901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4050711	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yashiro Naoki, Oohira Kouya, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 16
2. 論文標題 Improvement of Discrete Element Simulation Accuracy of Steel Powder Filling Behavior by Optimization of Contact and Friction Parameters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Tribology Online	6. 最初と最後の頁 16 ~ 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2474/trol.16.16	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shimizu Yohei, Kurokawa Takanori, Arai Hirokazu, Washizu Hitoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Higher-order structure of polymer melt described by persistent homology	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2274
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-80975-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 143
2. 論文標題 Influence of the Alumina Ceramic Coating on Friction and Stability of the Iron Contacts	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 31402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4048272	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Osaka Ai, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 15
2. 論文標題 Adaptive Smoothed Particle Hydrodynamics for Study of Friction of Silica at Micronscale	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Tribology Online	6. 最初と最後の頁 259 ~ 264
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2474/trol.15.259	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Isohashi Ai, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 142
2. 論文標題 Friction and Friction Heat of Micronscale Iron	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 91702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4046815	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Higuchi Yuji, Asano Yuta, Kuwahara Takuya, Hishida Mafumi	4. 巻 37
2. 論文標題 Rotational Dynamics of Water at the Phospholipid Bilayer Depending on the Head Groups Studied by Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 5329 ~ 5338
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c00417	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Higuchi Yuji	4. 巻 103
2. 論文標題 Coarse-grained molecular dynamics simulations of void generation and growth processes in the fracture of the lamellar structure of polyethylene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 42502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.103.042502	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuchiya Hinako, Sinawang Garry, Asoh Taka-aki, Osaki Motofumi, Ikemoto Yuka, Higuchi Yuji, Yamaguchi Hiroyasu, Harada Akira, Uyama Hiroshi, Takashima Yoshinori	4. 巻 21
2. 論文標題 Supramolecular Biocomposite Hydrogels Formed by Cellulose and Host-Guest Polymers Assisted by Calcium Ion Complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biomacromolecules	6. 最初と最後の頁 3936 ~ 3944
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.biomac.0c01095	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 樋口祐次	4. 巻 22
2. 論文標題 高分子材料の破壊に関する粗視化シミュレーション	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 216-221
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津仁志	4. 巻 23
2. 論文標題 分子シミュレーションによる高分子電解質溶液の構造およびダイナミクス	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 113-120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 65
2. 論文標題 分子シミュレーションによりわかる材料表面の水の構造と動態	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 616 ~ 622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18914/tribologist.65.10_616	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Go, Eimura Hiroki, Abbott Nicholas L., Kato Takashi	4. 巻 36
2. 論文標題 Biomolecular Binding at Aqueous Interfaces of Langmuir Monolayers of Bioconjugated Amphiphilic Mesogenic Molecules: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 12281 ~ 12287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.0c02191	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Konishi Subaru, Kashiwagi Yu, Watanabe Go, Osaki Motofumi, Katashima Takuya, Urakawa Osamu, Inoue Tadashi, Yamaguchi Hiroyasu, Harada Akira, Takashima Yoshinori	4. 巻 11
2. 論文標題 Design and mechanical properties of supramolecular polymeric materials based on host?guest interactions: the relation between relaxation time and fracture energy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 6811 ~ 6820
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0PY01347A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Go, Watanabe Hideyo, Suzuki Kota, Yuge Hidetaka, Yoshida Shintaro, Mandai Takuyoshi, Yoneda Shigetaka, Sato Hisako, Hara Mitsuo, Yoshida Jun	4. 巻 56
2. 論文標題 Visualizing the helical stacking of octahedral metallomesogens with a chiral core	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 12134 ~ 12137
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC05930G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Toshihiro, Mitani Masato, Yu Craig P., Mitsui Chikahiko, Yamagishi Masakazu, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Kumagai Shohei, Hashizume Daisuke, Tanaka Shota, Yano Masafumi, Kushida Tomokatsu, Sato Hiroyasu, Sugimoto Kunihisa, Kato Takashi, Takeya Jun	4. 巻 142
2. 論文標題 Alkyl-Substituted Selenium-Bridged V-Shaped Organic Semiconductors Exhibiting High Hole Mobility and Unusual Aggregation Behavior	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 14974 ~ 14984
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c05522	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Uchida Yoshiaki, Watanabe Go, Akita Takuya, Nishiyama Norikazu	4. 巻 124
2. 論文標題 Thermal Molecular Motion Can Amplify Intermolecular Magnetic Interactions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6175 ~ 6180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c05408	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Toshihiro, Kumagai Shohei, Fukuzaki Eiji, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Niitsu Naoyuki, Annaka Tatsuro, Yamagishi Masakazu, Tani Yukio, Sugiura Hiroki, Watanabe Tetsuya, Watanabe Shun, Takeya Jun	4. 巻 6
2. 論文標題 Robust, high-performance n-type organic semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eaaz0632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aaz0632	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yoneda Shigetaka, Saito Takami, Nakajima Daisuke, Watanabe Go	4. 巻 0
2. 論文標題 Potential of mean force and umbrella sampling simulation for the transport of oxazolidinone in heterotetrameric sarcosine oxidase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/prot.26060	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shikita So, Watanabe Go, Kanouchi Dai, Saito Junya, Yasuda Takuma	4. 巻 0
2. 論文標題 Alternating Donor?Acceptor Conjugated Macrocyclic Exhibiting Efficient Thermally Activated Delayed Fluorescence and Spontaneous Horizontal Molecular Orientation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Photonics Research	6. 最初と最後の頁 2100021 ~ 2100021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adpr.202100021	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 66
2. 論文標題 分子シミュレーションで解明されたトライボ現象	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 258-266
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18914/tribologist.66.04_258	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計220件 (うち招待講演 57件 / うち国際学会 67件)

1. 発表者名 Go Watanabe
2. 発表標題 Computational Prediction of Dynamics and Structure of Organic Semiconductor Crystals
3. 学会等名 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Go Watanabe
2. 発表標題 A Computational Approach for Predicting Dynamics and Structure of Organic Crystals,
3. 学会等名 The 6th International Conference on Molecular Simulation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 機能性ソフトマテリアルの構造・物性解明: 計算科学とデータ科学によるアプローチ
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 ソフトマター周囲の水分子の回転ダイナミクス
3. 学会等名 第15回分子集合系計算科学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 分子シミュレーションによるソフトマターの構造・物性の理解
3. 学会等名 日本物理学会 2024年春季大会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いた高分子材料の破壊メカニズムの解析
3. 学会等名 株式会社技術情報協会 セミナー (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 結晶性高分子の分子スケールにおける変形・破壊プロセスと低劣化・高耐久に向けた材料設計指針
3. 学会等名 サイエンス&テクノロジー株式会社 セミナー（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 分子スケールにおける高分子材料の内部構造と破壊メカニズム
3. 学会等名 株式会社 R & D 支援センター セミナー（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 高分子材料の機能物性に関するシミュレーションの基礎
3. 学会等名 第27回高分子計算機科学研究会講座（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 樋口祐次，菱田真史
2. 発表標題 水の回転拡散に対する第二水和圏の重要性
3. 学会等名 第37回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 高分子材料の変形・破壊に関する粗視化分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 本機械学会 第36回計算力学講演会 (CMD2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 分子シミュレーションによる分子の水和状態と水の回転拡散
3. 学会等名 第72回高分子討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 水素関連トライボロジーのナノシミュレーション技術
3. 学会等名 第110回 自動車のトライボロジー研究会, 兵庫県立大学データ計算科学センターセミナー (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 風力発電機の潤滑メンテナンスフリー化のための計算化学アプローチ
3. 学会等名 表面科学技術研究会2024カーボンニュートラルを目指して - 太陽光発電と風力発電の現状と将来展望 - (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 H. Washizu, K. Kawakita, T. Hasegawa, R. Araki, T. Horio, T. Kobayashi, R. Okamoto, K. Khajeh, Y. Ishii, N. Sugimura
2. 発表標題 Self-Assembly and Chemistry of Molecules in Oil Environment
3. 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 マイクロ・ナノシミュレーションによる軸受界面の解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 9 月例会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 富岳時代の大規模分子シミュレーション
3. 学会等名 電気三学会 (電気学会、電子情報通信学会、映像情報メディア学会) 関西支部「学生のための講演会」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 計算科学による水圏機能材料の設計
3. 学会等名 日本化学会秋季事業 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Simulation Approach for Self-Assembled Organic System
3. 学会等名 UC San Diego-KyotoU-KSAC Biointerfaces Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Data Science Approach in Japanese Tribology
3. 学会等名 STLE Virtual Symposium: Digital Tribology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 PFAS 分子集合体解析に向けたマルチスケールシミュレーション
3. 学会等名 持続可能社会創造ユニット令和5年度第1回ミーティング「PFAS科学の再出発に向けて」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 接触問題における数値シミュレーションの基礎と機械部品への適用
3. 学会等名 日本機械学会関西支部 第 385 回講習会「構造・強度設計における数値シミュレーションの基礎と応用」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷺津仁志
2. 発表標題 高分子界面近傍における水素結合特性と赤外振動バンドの全原子解析"
3. 学会等名 日本化学会104会春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 野田隆史, 高山裕貴, 桑本滋生, 園田健太郎, 鷺津仁志
2. 発表標題 せん断流下における潤滑グリースの増ちょう剤構造変化とレオロジー特性の相関性解明
3. 学会等名 日本化学会104会春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 藤田晃徳, 杉村奈都子, 鷺津仁志
2. 発表標題 SPH法による金属固体モデルの摺動部における焼き付きシミュレーション
3. 学会等名 第 2 回ソフトマテリアル工学 シミュレーション討論会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 友清貴之 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学法による層状酸化グラフェンの摩擦挙動シミュレーション
3. 学会等名 第 2 回ソフトマテリアル工学 シミュレーション討論会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 マルチスケール流体シミュレータの開発
3. 学会等名 第 2 回ソフトマテリアル工学 シミュレーション討論会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 荻田隼輔, 石井良樹, 鷲津仁志, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ネマチック-等方相転移の拡張アンサンブルによる高効率サンプリングと自由エネルギー解析
3. 学会等名 第 37 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤和輝, 樋口祐次, 端山昌樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた硬質材料の有無による結晶性高分子の摩擦挙動の差異
3. 学会等名 第 37 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 深谷剛, 清水陽平, 富山栄治, 鷲津仁志
2. 発表標題 トラクションフルードのマテリアルズインフォマティクス解析における MD シミュレーションデータの活用
3. 学会等名 第 37 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1 . 発表者名 M. Era, N. Sugimura, H. Washizu
2 . 発表標題 The Effect of Surface Properties on Friction in the Solid Friction Simulation
3 . 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 K. Nitta, Le Van Sang, N. Sugimura, H. Washizu
2 . 発表標題 Simulation of Solid Friction of Metal in Micron Scale using SPH Method
3 . 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 K. Ito, M. Hayama, Y. Higuchi, H. Washizu,
2 . 発表標題 Analysis of Friction Behavior of Crystalline Polymers With and Without Fillers by Coarse-Grained Molecular Dynamics Method
3 . 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 T. Fukaya, Y. Shimizu, E. Tomiyama, H. Washizu
2 . 発表標題 Predicting Traction Fluid Performance Using Materials Informatics
3 . 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu, K. Kawakita, M. Homma, R. Araki, Y. Ishii, H. Koshima
2. 発表標題 Molecular Simulation Approach for Dynamicsof Extreme Pressure Agents
3. 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference (TFC) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小川雄大, 伊藤和輝, 端山晶樹, 樋口祐次, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子界面における相構造と摩擦発現
3. 学会等名 第 13 回トライボロジー秋の学校 in 愛知
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 友清貴之, 鷲津仁志
2. 発表標題 反応力場分子動力学法を用いた多層酸化グラフェンの摩擦挙動解析
3. 学会等名 第 13 回トライボロジー秋の学校 in 愛知
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 花野竜士, 鷲津仁志
2. 発表標題 フルオロカーボンの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第 13 回トライボロジー秋の学校 in 愛知,
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤田晃徳, 江良瑞樹, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 PH法による金属固体の摩擦熱の解析
3. 学会等名 第 13 回トライボロジー秋の学校 in 愛知
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤和輝, 端山昌樹, 樋口祐次, 鷲津仁志
2. 発表標題 硬質粒子を含有させた結晶性高分子材料の粗視化分子動力学法を利用した摩擦挙動解析
3. 学会等名 本機械学会 第36回計算力学講演会 (CMD2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 荻田隼輔, 石井良樹, 鷲津仁志, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ネマチック-等方相転移の効率的状態サンプリングと自由エネルギーによる熱力学的記述
3. 学会等名 日本化学会秋季事業 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Khajeh, H. Washizu
2. 発表標題 Multiscale simulation hydro-thermal behavior of a polymer under shear flow
3. 学会等名 2023 ASME/BATH Symposium on Fluid Power and Motion Control (FPMC) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1 . 発表者名 H. Washizu
2 . 発表標題 Molecular Simulation Methods for Tribology
3 . 学会等名 6th International Conference on Molecular Simulation 2023 (ICMS 2023) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 S. Yamamoto, K. Kamio, S. Endo, H. Oshima, K. Khajeh, E. Tomiyama, H. Washizu
2 . 発表標題 analysis of the Viscosity Modifiers ' Behavior in Hydraulic Fluid by Means of Simulation
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 M. Era, N. Sugimura, H. Washizu
2 . 発表標題 Analysis of the Effect of Surface Properties on Friction Heat in the Solid Friction Simulation Using the SPH Method
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 T. Fukaya, Y. Shimizu, E. Tomiyama, H. Washizu
2 . 発表標題 Analysis of the Performance of Traction Fluids Molecules Using Materials Informatics
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 N. Sugimura, M. Era, R. Tsuda, K. Nitta, Y. Mihara, H. Washizu
2 . 発表標題 A Particle Method Simulation Approach to Boundary Lubrication Friction
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 N. Sugimura, M. Era, R. Tsuda, K. Nitta, Y. Mihara, H. Washizu
2 . 発表標題 A Particle Method Simulation Approach to Boundary Lubrication Friction
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 K. Ito, M. Hayama, Y. Higuchi, H. Washizu
2 . 発表標題 Friction Behavior of Polymer Films Containing Hard Materials: A Molecular-dynamics Simulation
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 K. Nitta, Le Vang Sang, N. Sugimura, H. Washizu
2 . 発表標題 Analysis of Sliding and Friction Heat in Micron-scale Metals Using SPH Method
3 . 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Khajeh, H. Washiz
2. 発表標題 ybrid Model for Predicting the Rheological Properties of Polymer Additives under Shear Flow
3. 学会等名 9th International Tribology Conference (ITC) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石井 良樹, 鷺津 仁志,
2. 発表標題 ソフトマテリアル界面の水和機能解明に向けた計算化学とその応用展開
3. 学会等名 第72回高分子討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu, K. Kawakita ¹ , T. Hasegawa, R. Araki, T. Horio, T. Kobayashi ¹ , Le Nhu Minh Tue, Y. Ishii, R. Okamoto, K. Khajeh, N. Sugimura
2. 発表標題 Self-Assembly of Molecules in Oil Environment
3. 学会等名 Tribochemistry Beppu 2023, Beppu (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 深谷剛, 清水陽平, 富山栄治, 鷺津仁志
2. 発表標題 トラクションフルードにおけるマテリアルズインフォマティクスの活用
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 9月例会 ポスター発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 江良瑞樹, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 金属の固体摩擦における摩擦熱のSPH法による解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 9月例会 ポスター発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 新田啓人, Le Vang Sang, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 SPH法による弾性固体の摩擦シミュレーション
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 9月例会 ポスター発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤和樹, 樋口祐次, 端山昌樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 硬質材料を含む結晶性高分子と無添加結晶性高分子の粗視化分子動力学法を利用した摩擦挙動解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 9月例会 ポスター発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Togashi, K. Khajeh, H. Washizu
2. 発表標題 Contribution of Brownian motion and flow in the molecular of VWF protein during the early stages of thrombus formation
3. 学会等名 Summer undergraduate research poster session, University of Washington (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Khajeh, H. Washizu
2. 発表標題 A hybrid approach for characterizing hydro-thermal effects of polymer additives under shear flow
3. 学会等名 The 4th The Fluids Engineering Divisions (FEDs) of ASME, JSME, KSME (AJKFED) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉村奈都子, 津田亮, 江良瑞樹, 新田啓人, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 粒子法を用いた弾性接触解析シミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議2023 春 東京
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 深谷剛, 清水陽平, 富山栄治, 鷲津仁志
2. 発表標題 トラクションフルードのマテリアルズインフォマティクス解析
3. 学会等名 トライボロジー会議2023 春 東京
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤和輝, 端山昌樹, 樋口祐次, 鷲津仁志
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いたカーボンナノチューブ含有の有無による結晶性ポリマーの摩擦挙動
3. 学会等名 トライボロジー会議2023 春 東京
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 新田啓人, Le Vang Sang, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 クロススケールにおける金属の粗視化SPH摺動シミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議2023 春 東京
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 江良瑞樹, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 PH 法を用いた金属の固体摩擦シミュレーションによる摩擦熱の解析
3. 学会等名 トライボロジー会議2023 春 東京
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu, H. Akiyama, R. Nakae, Y. Hamano, K. Torimoto, Y. Tanaka, R. Okamoto
2. 発表標題 Analysis of Boundary Lubrication of DLC Using Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 023 STLE Annual Meeting & Exhibition (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Washizu, K. Kawakita, T. Hasegawa, R. Araki, T. Horio, Le Nhu Minh Tue, Y. Ishii, R. Okamoto, K. Khajeh, N. Sugimura
2. 発表標題 Molecular Simulations of Self-Assembled Structures in Oil EnvironMolecular Simulations of Self-Assembled Structures in Oil Environment
3. 学会等名 d Korea Tribology International Symposium (K-TIRIB) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, Jun Yoshida
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study of Helical Columnar Liquid Crystals Based on Propeller-Shaped Metallomesogens
3. 学会等名 ILCC2022, オンライン, オンライン (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Go Watanabe
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study for Self-Assembling Soft Materials
3. 学会等名 OLC2021 Satellite Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Go Watanabe
2. 発表標題 Computational prediction of dynamics and structure of organic semiconductor crystals
3. 学会等名 RIKEN CEMS Topical Meeting Online (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 露木弘美, 上田智也, 西村慎之介, 塩本昌平, 村上大樹, 田中賢, 渡辺豪
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いた生体親和性材料へのタンパク質吸着挙動の解明
3. 学会等名 第35回北里バイオサイエンスフォーラム, オンライン, オンライン
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三浦大輝, 渡辺豪
2. 発表標題 分子動力学計算によるグルタミンペプチドの自己集合構造の解明
3. 学会等名 第35回北里バイオサイエンスフォーラム, オンライン, オンライン
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 露木弘美, 上田智也, 西村慎之介, 塩本昌平, 村上大樹, 田中賢, 渡辺豪
2. 発表標題 生体親和性ポリマーブラシへのタンパク質吸着挙動に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第71回高分子討論会, 北海道大学札幌キャンパス, 札幌
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井佐和, 露木弘美, 芹澤武, 渡辺豪
2. 発表標題 分子動力学計算による結晶性セルロース集合体に対するタンパク質の吸着ダイナミクス解明
3. 学会等名 第71回高分子討論会, 北海道大学札幌キャンパス, 札幌
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 關拓和, 竹谷純一, 岡本敏宏, 渡辺豪
2. 発表標題 分子動力学計算による有機半導体が示す構造相転移の再現
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会, 東北大学 川内北キャンパス, 宮城県仙台市
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 伊藤良将, 佐藤俊輔, 關拓和, 竹谷純一, 岡本敏宏, 渡辺豪
2. 発表標題 有機半導体結晶の高精度な構造予測手法の開発
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会, 東北大学 川内北キャンパス, 宮城県仙台市
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 關拓和, 竹谷純一, 岡本敏宏, 渡辺豪
2. 発表標題 有機半導体分子が示す結晶多形を再現する分子動力学計算手法の確立
3. 学会等名 第12回CSJ化学フェスタ, タワーホール船堀, 東京都江戸川区
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuji Higuchi
2. 発表標題 Fracture Process of Polymer Materials by Molecular Simulation
3. 学会等名 The 71st SPSJ Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 ソフトマター材料の変形・破壊・自己組織化に関する分子シミュレーション
3. 学会等名 日本接着学会 東北・北海道支部講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 分子シミュレーションによる高分子材料の内部構造と破壊メカニズムの解析
3. 学会等名 株式会社 R & D 支援センター セミナー (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 リン脂質二重膜上の水分子のダイナミクス
3. 学会等名 Mini-Symposium on Liquids 2022 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 樋口祐次、伊藤弘明、下川直史
2. 発表標題 荷電リン脂質二重膜の分子シミュレーション
3. 学会等名 第71回高分子討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 モビリティ変革の時代に求められるマイクロナノ・トライボシミュレーション
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志, Le Van Sang, N. Sugimura
2. 発表標題 Multiscale Approach for Solid Lubrication, Friction and Wear
3. 学会等名 The 10th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野田隆史, 長谷川智也, 鷲津仁志
2. 発表標題 放射光と分子シミュレーションによる油中の逆ミセルの配向過程解析
3. 学会等名 "超" を目指す軸受技術研究会第 63 回研究会 京都大学 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 オープンソースのソフトウェアを活用した分子動力学解析
3. 学会等名 兵庫県立大学産学連携・研究推進機構 (オンライン) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 水を中心とする高分子の溶媒効果
3. 学会等名 第26回高分子計算機科学研究会講座, 高分子学会 (オンライン) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いたトライボロジーの研究入門
3. 学会等名 日本トライボロジー学会 添加剤技術研究会（オンライン）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 ナノトライボシミュレーションによる分子集団の動的現象評価
3. 学会等名 創形創質工学部会 第53回トライボロジーフォーラム研究会（オンライン）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子と水のナノ界面における水分子の相互作用とOH伸縮振動モードの空間分割解析
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kosar Kajeh, 鷲津仁志
2. 発表標題 Hydraulic fluids: From field challenges to multiscale simulation
3. 学会等名 ソフトマテリアル工学シミュレーション研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小林健洋, 石井良樹, 岡本隆一, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法を用いた有機系単分子膜に関する挙動解析
3. 学会等名 第 36 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子中に不均一分布した水分子に対する OH 伸縮振動モードの空間分割解析
3. 学会等名 第 36 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 富樫太輝, Kosar Kajeh, 鷲津仁志
2. 発表標題 血栓形成初期過程におけるVWFタンパクの分子運動におけるブラウン運動と流れの寄与
3. 学会等名 第45回日本分子生物学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林健洋, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 有機系単分子膜の自己組織化に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡部侑弥, 石井良樹, ?鷺津仁志
2. 発表標題 多層酸化グラフェンシートの反動力場を用いた摩擦挙動解析
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本周平, 遠藤聡太, 神尾和教, 尾嶋拓, 石井良樹, Kosar Khajeh, 富山栄治, ?鷺津仁志
2. 発表標題 ?油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 片山溪太郎, 石井良樹, ?鷺津仁志
2. 発表標題 共有結合性材料表面における水潤滑膜の分子動力学解析
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 荒木陸, 甲嶋宏明, 石井良樹, ?鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学法による硫黄系極圧添加剤と金属表面の化学吸着解析
3. 学会等名 日本トライボロジー学会, 福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 原光生, 渡辺豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子・液晶中の水分子集団の振動現象に関する実験・計算の複合的アプローチ
3. 学会等名 第 71 回高分子討論会, 北海道大学
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 河合優作, 朴峻秀, 石井良樹, 村山駿介, 以倉峻平, 大崎基史, 池本夕佳, 山口浩靖, 原田明, 鷲津仁志, 松葉豪, 高島義徳
2. 発表標題 可動性デュアルクロスネットワーク材料の作製と高ヤング率ポリマーとの複合化
3. 学会等名 第 71 回高分子討論会, 北海道大学
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡部侑弥, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 反応力場を用いた多層酸化グラフェンシートの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 荒木陸, 甲嶋宏明, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 硫黄系極圧添加剤における反応力場を用いた化学吸着解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 片山溪太郎, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 反応力場による共有結合性材料表面と水分子集団の MD シミュレーション
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Khajeh, G. Sawai, H. Washizu
2. 発表標題 Dynamics of polymers in the simple shear flow: Multi-scale investigation
3. 学会等名 2022JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference?MIPE2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Ishii, K. Kawakita, H. Koshima, H. Washizu
2. 発表標題 On the aggregation and thermodynamic properties of organophosphate-based additives in a base oil observed by molecular dynamics simulation
3. 学会等名 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference?MIPE2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Araki, H. Koushima, Y. Ishii, H. Washizu
2. 発表標題 Surface adsorption analysis of sulfur extreme pressure additives to metal surfaces using molecular dynamics
3. 学会等名 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference?MIPE2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1 . 発表者名 K. Katayama, Y. Ishii, H. Washizu
2 . 発表標題 Friction behavior analysis of water molecules on silicon surfaces by Reactive Force Field
3 . 学会等名 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference?MIPE2022 (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 Y. Okabe, Y. Ishii, H. Washizu
2 . 発表標題 Friction behavior analysis of graphene oxide sheet by molecular dynamics simulation with reactive force field
3 . 学会等名 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference?MIPE2022 (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 H. Washizu
2 . 発表標題 Multi-physics and chemical understanding of boundary lubrication using molecular based simulations
3 . 学会等名 7th World Tribology Congress, WTC2022 Lyon, France (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 Y. Hamano, H. Akiyama, Y. Ishii , H. Washizu
2 . 発表標題 Chemical Reaction of Alcohol due to Friction between Zirconia and Metal
3 . 学会等名 7th World Tribology Congress, WTC2022 Lyon, France (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Matsuoka , Y. Ishii, H. Washizu
2. 発表標題 Mechanism of low friction of graphene in ambient air condition
3. 学会等名 7th World Tribology Congress, WTC2022 Lyon, France (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Kawakita, Y. Ishii, H. Koshima, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation for Analysis of the Behavior of Organophosphate Aggregates in Oil
3. 学会等名 7th World Tribology Congress, WTC2022 Lyon, France (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Washizu , G. Sawai, D. Talukdar, K. Khajeh
2. 発表標題 Multi-physics Simulation Approach to Analyze Viscosity Index Improver of Engine Oil?
3. 学会等名 COMODIA 2022, Hokkaido Univ., Sapporo, Hokkaido? (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡部侑弥, 石井良樹, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる酸化グラフェンシートの摩擦挙動解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2022 春 東京, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 荒木陸, 甲嶋宏明, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法を用いた硫黄系極圧添加剤の表面吸着解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2022 春 東京, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 片山溪太郎, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 反応力場によるシリコン基板と水分子集団のMDシミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議 2022 春 東京, (オンライン)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Washizu, R. Matsuoka, Y. Ishii
2. 発表標題 Mechanism of Low Friction of Multi-Layer Graphene in Ambient Air Condition
3. 学会等名 2022 STLE Annual Meeting & Exhibition USA (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 ソフトマター界面の大規模シミュレーション
3. 学会等名 SOL CAEフォーラム 2021 (オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションでわかってきた目から鱗のトライボロジー
3. 学会等名 第 104 回 自動車のトライボロジー研究会, 第 109 回 東海トライボロジー研究会 (オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 摩擦制御に関連するソフトマターシミュレーション
3. 学会等名 新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会高分子WG 講演会 (オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 粒子法を用いた大規模計算によるメソスケール境界潤滑摩擦へのアプローチについて
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 秋 松江, (オンライン), 146
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 端山昌樹, 樋口祐次, 鷲津仁志
2. 発表標題 粗視化分子シミュレーションによるポリマー表面の摩擦の解析
3. 学会等名 ライボロジー会議 2021 秋 松江, (オンライン), 70
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 片山溪太郎, 石井良樹, 鷲津仁志
2. 発表標題 シリコン基板上的の水分子集団の摩擦挙動解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 秋 松江, (オンライン), 202
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長谷川智也, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 散逸粒子動力学による油中のミセル形成シミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 秋 松江, (オンライン), 489
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 河北恭佑, 石井良樹, 甲嶋宏明, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法による油中リン酸エステル会合体の分子挙動の解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 秋 松江, (オンライン), 476
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 鳥居肇, 池本夕佳, 鷲津仁志
2. 発表標題 PMEA と水の相互作用の分子動力学解析: 水の状態と局所物性
3. 学会等名 第70回高分子討論会, 東京理科大学 (オンライン), 2H17
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 河合優作, 朴峻秀, 石井良樹, 村山駿介, 以倉峻平, 大崎基史, 池本夕佳, 浦川理, 山口浩靖, 井上正志, 原田明, 鷲津仁志, 松葉豪, 高島義徳
2. 発表標題 可動性デュアルクロスネットワーク材料の作製と力学 特性評価
3. 学会等名 第70回高分子討論会, 東京理科大学 (オンライン), 1K10
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 澤井源太郎, Deboprasad Talukdar, 鷲津仁志
2. 発表標題 潤滑油中の粘度指数向上剤の動的挙動解析
3. 学会等名 日本機械学会 2021年度年次大会, 千葉大学 (オンライン), S071-01
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Effect of water atmosphere on low friction of multi-layer graphene studied by molecular dynamics
3. 学会等名 CCP2021 (XXXII IUPAP Conference on Computational Physics), Coventry, England (Online), 126 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Ishii, Le Nhu Minh Tue, Van Sang Le, H. Washizu
2. 発表標題 Structural Properties of Water Molecules around the PEG and alpha-Cyclodextrin onto Gold Surface by MD Simulation
3. 学会等名 第 70 回高分子学会年次大会, (オンライン), 1Pb034
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲津仁志, 松岡諒, 石井良樹
2. 発表標題 グラファイトが大気環境下で低摩擦を示すためのシナリオ
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 春 東京, (オンライン), 103
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲津仁志, 杉村奈都子, 三原雄司, Le Van Sang, 石井良樹, Deboprasad Talukdar
2. 発表標題 マルチスケール材料シミュレーションによる自動車用パワートレーンの解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2021 春 東京, (オンライン), 14
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Analyses of Interfaces of Electrolytes and Water environments using Multi-Scale Molecular Simulations
3. 学会等名 Next generation of Dental Science from Ab Initio Calculation to Medical Practice, Kyoto Institute of Technology, (Online) (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu, Rio Nakae, Yoshiki Iike, Hiroaki Koshima
2. 発表標題 Mechanism of Physical Adsorption and Chemical Reactions in Boundary Lubrications
3. 学会等名 2020 International Conference on Engineering Tribology and Applied Technology, (Online)(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Gentaro Sawai, Taiki Kawate, Soma Usui, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Evaluation of Viscosity of Oil Solution with Viscosity Index Improver by Hybrid Simulation
3. 学会等名 2020 STLE Tribology Frontiers Virtual Conference, (Online) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryo Matsuoka, Yoshiki Ishii, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Effect of Water Atmosphere on Friction of Multilayer Graphene Studied by Reactive Molecular Dynamics
3. 学会等名 2020 STLE Tribology Frontiers Virtual Conference, (Online) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 ナノチャンネルを形成する自己組織化イオン液晶の全原子分子シミュレーション
3. 学会等名 第 69 回高分子討論会, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 電解質溶液・その界面のマルチスケールシミュレーション
3. 学会等名 ESICB 触媒・電池・電子論検討会, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 スーパーコンピューター富岳時代の産学連携
3. 学会等名 IT21の会12月例会, 日本技術士会, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションによる基油・添加剤の解析
3. 学会等名 2020 石油製品討論会, 石油学会, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 分子シミュレーションで解き明かす有機材料の分子描像
3. 学会等名 第9回Qコロキウム オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 分子シミュレーションによる液晶の微視的描像解明
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開2020」, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションでわかる目から鱗のトライボロジー
3. 学会等名 トライボロジー研究会 第31回講演会, オンライン開催 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Go Watanabe, Takuyoshi Mandai, Mitsuo Hara, Jun Yoshida
2. 発表標題 Elucidating Helical Structure of Columnar Liquid Crystals Formed by Chiral Octahedral Metallomesogens Using Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 69th Symposium on Macromolecules, (Online) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yohei Shimizu, Takanori Kurokawa, Hirokazu Arai, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Estimation of higher order structure of model polymer using persistent homology and machine learning
3. 学会等名 第 69 回高分子学会年次大会, 福岡国際会議場, 福岡県福岡市
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Nobuyuki Matubayasi, Takashi Kato, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Modeling of Self-Organized Ionic Liquid Crystals: Nanochannel and the Hydration Properties
3. 学会等名 第 69 回高分子学会年次大会, 福岡国際会議場, 福岡県福岡市
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松岡 諒, 石井良樹, 鷺津仁志
2. 発表標題 反応分子動力学による層状グラフェン移着片の摩擦挙動に対する雰囲気の影響
3. 学会等名 トライボロジー会議 2020秋 別府, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松岡 諒, 鷺津仁志
2. 発表標題 反応分子動力学を用いた層状グラフェン移着片の摩擦挙動の解析
3. 学会等名 2020年度 日本機械学会年次大会, 名古屋, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷺津仁志,
2. 発表標題 境界潤滑摩擦に関するSPH法に基づく粗視化シミュレーションモデル開発
3. 学会等名 2020 年度日本機械学会年次大会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷺津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジーを記述子としたポリマー高次構造の解明と電気特性の回帰予測
3. 学会等名 2020年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷺津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶のナノチャネルの中での水分子のダイナミクス
3. 学会等名 溶液化学若手の会オンラインシンポジウム2020, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷺津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶の全原子分子シミュレーション：ナノチャネル構造と分子輸送解析
3. 学会等名 2020年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池本夕佳, 原田慈久, 田中 賢, 村上大樹, 西村慎之介, 倉橋直也, 森脇太郎, 山添康介, 鷺津仁志, 石井良樹, 鳥居 肇
2. 発表標題 加湿赤外顕微分光による高分子材料の状態解析
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会・放射光科学合同進歩事務, オンライン開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池本夕佳, 原田慈久, 田中 賢, 村上大樹, 西村慎之介, 倉橋直也, 森脇太郎, 山添康介, 鷺津仁志, 石井良樹, 鳥居 肇
2. 発表標題 加湿赤外顕微分光による高分子材料と水の状態解析
3. 学会等名 日本物理学会2021年第76回年次大会, オンライン開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 土屋日奈子, Sinawang Garry, 麻生隆彬, 大崎基史, 池本夕佳, 樋口祐次, 山口浩靖, 原田明, 宇山 浩, 高島義徳
2. 発表標題 ホスト-ゲスト包接錯体と金属配位結合によって架橋されたセルロースナノファイバー複合超分子材料
3. 学会等名 第69回高分子討論会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤島瑛大, 宮下大勇, 櫻井庸明, 渡辺 豪
2. 発表標題 分子動力学計算によるネマチック液晶中における蛍光分子の静的構造・動的挙動の解析
3. 学会等名 2020年日本液晶学会オンライン研究発表会 オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 ポリエチレンの融解挙動に関する粗視化分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 大規模粗視化分子動力学法を活用した結晶性高分子の融解
3. 学会等名 第69回高分子討論会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 計算科学による水圏機能材料の設計
3. 学会等名 日本化学会秋季事業 第 10 回CSJ化学フェスタ2020, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 澤井源太郎, 川手大樹, 臼井颯馬, 鷲津仁志
2. 発表標題 せん断場における粘度指数向上剤の動的挙動に関する考察
3. 学会等名 2020 年度 日本機械学会年次大会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 弾塑性体アスペリティ摺動摩擦のメソスケールSPHシミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議 2020秋 別府, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 自己組織化イオン液晶のナノチャネルにおける水和様態の分子動力学解析
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会, オンライン開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いた自己組織化イオン液晶のナノチャネルにおける水和様態解析
3. 学会等名 化学工学会第86年会, オンライン開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中塚佳奈, 小林健洋, 松岡 諒, 石井良樹, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いたコラーゲンのグラフェン吸着の考察
3. 学会等名 第23回化学工学会学生発表会, オンライン開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 澤井源太郎, 川手大樹, 臼井颯馬, 鷺津仁志
2. 発表標題 粘度指数向上剤を含む潤滑油の粘度評価
3. 学会等名 トライボロジー会議2020 秋 別府, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 萬代拓由, 吉田晋太郎, 吉田 純, 原 光生, 渡辺豪
2. 発表標題 ??体型?属錯体分?が発現するカラムナー液晶の分?動?学シミュレーション
3. 学会等名 2020年日本液晶学会オンライン研究発表会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションで観測する機能性イオン液晶膜を透過する水分子のダイナミクス
3. 学会等名 兵庫県立大学 知の交流シンポジウム 2020, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井良樹, 松林伸幸, 渡辺 豪, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 Confined Water inside the Nanochannels of Self-Assembled Ionic Liquid Crystal via MD and DFT Simulations
3. 学会等名 イオン液体Workshop 2020, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 樋口祐次, 浅野優太, 桑原卓哉, 菱田真史
2. 発表標題 全原子分子動力学法とDFTB分子動力学法によるリン脂質二重膜上の負の水和
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開2020」, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular and Meso Simulations for Solid Friction and Boundary Lubrication
3. 学会等名 Special livMatS symposium on Tribology, University of Freiburg, Freiburg, Germany (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Colloid Science in Oil Environment
3. 学会等名 Tribochemistry Hakodate 2019, Hotel Takubokutei, Hakodate, Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Origin of Limiting Shear Stress of Elastohydrodynamic Lubrication Oil Film
3. 学会等名 3rd Czech-Japan Tribology Workshop, Vinice Hnanice, Hnanice, Czech Republic (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Simulation Approach for Water on Surfaces
3. 学会等名 German-Japanese Workshop "Aquatic Materials Made to Order", Heidelberg University, Heidelberg, Germany (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Simulations for Additives and Coatings
3. 学会等名 46th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Valpre, Lyon, France (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Higuchi
2. 発表標題 Mechanical Properties of Semicrystalline Polymers at the Molecular Level by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 The Second International Conference of Polymeric and Organic Materials in Yamagata University, Yonezawa, Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Go Watanabe, Hiroki Eimura, Nicholas L. Abbott, Takashi Kato
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Biomolecular Adsorption onto Langmuir Monolayers of Bioconjugated Amphiphilic Mesogens
3. 学会等名 German-Japanese Workshop "Aquatic Materials Made to Order", Heidelberg University, Heidelberg, Germany (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Mirjam Base, Florian Rummel, Hitoshi Washizu, Vlad Bodgan Niste, Stephan Henzler, Rebekka Drafz
2. 発表標題 GfT Young Tribologists: How Tribology Grows Further and Further
3. 学会等名 22nd International Colloquium Tribology, Technische Akademie Esslingen, Esslingen, Germany (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuko Teramae, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Modeling of Viscosity Index Improver with Functional Group Effect
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai International Center, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu Soma Usui, Taiki Kawate
2. 発表標題 Dynamics of Viscosity Index Improver Polymers under Shear and Confinement
3. 学会等名 STLE Tribology Frontiers Conference, Historic Drake Hotel, Chicago, USA (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Simulation Approach for Aquatic Functional Surfaces
3. 学会等名 5th International Conference on Molecular Simulation 2019 (ICMS 2019), Lotte Hotel Jeju in Jeju Island, South Korea (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular simulations of polyelectrolyte brush under external field
3. 学会等名 Okinawa Colloids 2019, Bankoku Shinryokan, Nago, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu, Soma Usui, Taiki Kawate
2. 発表標題 Multi-Physics Simulations for Viscosity Index Improving Polymers
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai International Center, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Le Van Sang, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Friction and friction heat study of microscale materials by particle coarse-graining and smoothed particle hydrodynamics simulation
3. 学会等名 International Symposium on Applied Science 2019, Ho Chi Minh City University of Technology, Ho Chi Minh City, Vietnam (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Natsuko N. Sugimura, Le Van Sang, Yuji Mihara, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Development of the Simulation Model About Dry Asperity Friction and Wear by SPH Method with Disk-Like Particles
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai International Center, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Nobuyuki Matubayasi, Takashi Kato, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Modeling of Functional Ionic Liquid Crystal: Structural and Hydration Properties
3. 学会等名 German-Japanese Workshop "Aquatic Materials Made to Order", University of Heidelberg, Heidelberg, Germany (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Go Watanabe, Mitsuo Hara, Jun Yoshida
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Chiral Columnar Liquid Crystals with Helical Structure
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation, Jeju, South Korea (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular simulations for polymer binder of sodium ion batteries
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (MRM2019), Yokohama Symposia, Yokohama, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Higuchi
2. 発表標題 Large Deformation of Polymeric Materials and Biomolecules by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 German-Japanese Workshop "Aquatic Materials Made to Order", Heidelberg University, Heidelberg, Germany (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuko Teramae, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Structure Comparison using Coarse-Grained Model for Viscosity Index Improver
3. 学会等名 46th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Valpre, Lyon, France (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジを用いた大規模シミュレーションによるポリマー高次構造の推定
3. 学会等名 第 68 回高分子討論会, 福井大学文京キャンパス, 福井県福井市 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子溶液のせん断下のマルチフィジックス解析
3. 学会等名 日本伝熱学会関西支部 第26 期 第 2 回 講演討論会, 同志社大学今出川キャンパス, 京都府京都市, (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 摩擦や電池のシミュレーション学 -トライボロジーの世界をのぞいてみよう-
3. 学会等名 明治大学横断研究会定例勉強会, 明治大学駿河台キャンパス, 東京都千代田区 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 ソフトマター界面におけるマルチフィジックスシミュレーション
3. 学会等名 つくばソフトマター研究会2019, 高エネルギー加速器研究機構, 茨城県つくば市 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺豪
2. 発表標題 計算化学で視るソフトマターの分子描像
3. 学会等名 構造有機化学研究会ミニシンポジウム2019, 北里大学相模原キャンパス, 神奈川県相模原市 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺豪
2. 発表標題 計算科学で解き明かすソフトマターのミクロな世界
3. 学会等名 電気学会四国支部 講演会, 愛媛大学城北キャンパス, 愛媛県松山市 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Nobuyuki Matubayasi, Takashi Kato, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Modeling of Nano-Structured Ionic Liquid Crystal: Structural and Water Adsorption Properties
3. 学会等名 日本化学会第 100 春季年会 2020, 東京理科大学野田キャンパス, 千葉県野田市
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Vang Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 Disklike SPH 法を用いた弾塑性体の摩擦界面に関する研究
3. 学会等名 日本機械学会 2019 年度 年次大会, 秋田大学手形キャンパス, 秋田県秋田市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Vang Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 金属アスペリティ摩擦のメソスケール機構解明に関するSPHシミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会, 名古屋大学東山キャンパス, 愛知県名古屋市
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Vang Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 摩耗, 発熱, 塑性を考慮したせん断摩擦に関するSPHシミュレーション
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会, 名古屋市公会堂, 愛知県名古屋市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジと機械学習を用いたポリマー電気特性の予測
3. 学会等名 2019年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, DIC, 東京都中央区
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井良樹, 渡辺 豪, 松林伸幸, 加藤隆史, 鷲津仁志
2. 発表標題 ナノ構造イオン液晶の分子動力学研究: 吸水性と拡散性
3. 学会等名 化学工学会第85年会, 関西大学千里山キャンパス, 大阪府吹田市
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田晋太郎, 萬代拓由, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田茂隆
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるキラルカラムナー液晶のらせん構造解明
3. 学会等名 2019年日本液晶学会討論会, 筑波大学筑波キャンパス, 茨城県つくば市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺 豪
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションで解き明かす液晶の分子描像
3. 学会等名 第68回高分子討論会, 福井大学文京キャンパス, 福井県福井市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡辺 豪, 栄村弘希, アボット ニコラス, 加藤隆史
2. 発表標題 バイオ共役メソゲンが形成する水面上単分子膜への生体分子吸着に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第68回 高分子討論会, 福井大学文京キャンパス, 福井県福井市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた持続応力による結晶性高分子の変形と破壊
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会, 岐阜大学柳戸キャンパス, 岐阜県岐阜市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 大規模粗視化シミュレーションによる結晶性高分子の物性測定
3. 学会等名 第68回高分子討論会, 福井大学文京キャンパス, 福井県福井市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志 白井颯馬, 川手大樹, 寺前裕生子
2. 発表標題 エンジンオイル添加高分子のマルチフィジックスシミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会 2019 年度 年次大会, 秋田大学手形キャンパス, 秋田県秋田市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志 白井颯馬, 川手大樹, 寺前裕生子
2. 発表標題 粘度調整剤高分子溶液のマルチフィジックス解析
3. 学会等名 第68 回高分子討論会, 福井大学文京キャンパス, 福井県福井市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寺前裕生子, 鷲津仁志
2. 発表標題 高VI添加剤の官能基に着目した粗視化分子モデリング
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松岡 諒, 鷲津仁志
2. 発表標題 層状グラフェン移着片の摩擦挙動の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第10回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知県名古屋市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松岡 諒, 鷲津仁志
2. 発表標題 層状グラフェン移着片の摩擦挙動の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第 23 回分子シミュレーション学会 夏季研究会, 蘭亭, 宮城県仙台市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 鷲津仁志
2. 発表標題 表面粗さや異物を含むメソスケールの摩擦摩耗解析モデルの提案
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 鷲津仁志
2. 発表標題 京」の大規模シミュレーション及び機械学習を用いた最適ポリマー材料探索
3. 学会等名 兵庫県立大学知の交流シンポジウム 2019, 神戸商工会議所会館, 兵庫県神戸市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジと大規模シミュレーションを組み合わせたポリマーの高次構造の推定
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会, 名古屋市公会堂, 愛知県名古屋市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樋口祐次
2. 発表標題 粗視化分子動力学法を用いた結晶性高分子の融解プロセス
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会（開催中止・発表証明）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 澤井源太郎, 白井颯馬, 川手大樹, 鷺津仁志
2. 発表標題 高VI添加剤高分子の摺動下のダイナミクス
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田晋太郎, 一川尚広, 渡辺 豪, 米田茂隆
2. 発表標題 モノレインのリオトロピック液晶に関する分子動力学計算
3. 学会等名 2019年日本液晶学会討論会, 筑波大学筑波キャンパス, 茨城県つくば市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田晋太郎, 萬代拓由, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田茂隆
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるキラルカラムナー液晶のらせん構造解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会, 名古屋市公会堂, 愛知県名古屋市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤島瑛大, 渡辺 豪, 張婉瑩, 櫻井庸明, 趙 成龍, 吉田浩之, 尾崎雅則, 関 修平, 米田茂隆
2. 発表標題 分子動力学計算を用いた高蛍光性液晶の構造・挙動解析
3. 学会等名 2019年日本液晶学会討論会, 筑波大学筑波キャンパス, 茨城県つくば市
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 萬代拓由, 吉田晋太郎, 吉田 純, 原 光生, 渡辺 豪, 米田茂隆
2. 発表標題 八面体型金属錯体が形成するカラムナー液晶の微視的構造解析
3. 学会等名 2019年日本液晶学会討論会, 筑波大学筑波キャンパス, 茨城県つくば市
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 鷲津仁志	4. 発行年 2020年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 550
3. 書名 高分子材料のトライボロジー制御	

〔産業財産権〕

〔その他〕

兵庫県立大学のスパコン紹介と「分子シミュレーションによる摩擦の研究」 https://www.youtube.com/watch?v=K8zLd1bWk5o

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	渡辺 豪 (Watanabe Go) (80547076)	北里大学・未来工学部・教授 (32607)	
研究分担者	樋口 祐次 (Higuchi Yuji) (30613260)	九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授 (17102)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関