

令和 5 年 6 月 22 日現在

機関番号：14303

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K05209

研究課題名（和文）反応分子動力学法を用いた炭素構造体中の過冷却水のダイナミクス解析

研究課題名（英文）Analysis of the dynamics of supercooled water in carbon materials using reactive molecular dynamics simulations

研究代表者

水口 朋子（Mizuguchi, Tomoko）

京都工芸繊維大学・材料化学系・准教授

研究者番号：90758963

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：カーボンナノチューブ（CNT）内の水の挙動を明らかにするために、反応力場ReaxFFを用いた分子動力学シミュレーションを実行した。4つのReaxFFパラメータを用いて結果を比較したところ、水がCNT内に流入する速度が異なり、うち一つの力場はCNT内に水が全く流入しないことが分かった。次に、CNTを脂質膜に貫通させ、OHラジカルの透過のシミュレーションを実行した。その結果、末端に水素が付いただけのCNTでは、水は容易に通すが、ラジカルは通らないことが分かった。比較のため、アクアポリンでラジカル透過のシミュレーションを実行したところ、わずかなOHラジカルが水と水素結合して通過する様子が見られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

CNTを用いた膜透過の研究は、CNTの末端修飾により選択的な分子透過システムを実現する可能性を秘めている。OHラジカルをガン細胞に選択的に透過させることができれば、ガン細胞を狙い撃ちした治療システムの構築に繋がる。アクアポリンを透過させるシミュレーションでは、入り口付近にエネルギー障壁があることが分かったため、CNTの末端修飾により入り口の障壁を下げてやれば、水との複合体として透過が可能かもしれない。ラジカルのような反応性が高い種を扱うときには、反応力場を用いたシミュレーションが力を発揮するので、そのパラメータ調整を含めて計算を進めていくことが重要である。

研究成果の概要（英文）：To investigate the behavior of water within a carbon nanotube (CNT), molecular dynamics simulations using the reactive force field, ReaxFF, were carried out. First, four different parameter sets of ReaxFF were evaluated, revealing significant variations in the rate of water penetration into the CNT depending on the chosen parameter set. One particular parameter set precluded any water penetration into the CNT. Subsequently, simulations were conducted to examine the permeation of water and OH radicals through the CNT vertically penetrating a lipid membrane. The findings indicated that the CNT, featuring hydrogen terminations at its ends, allow water to pass through, but not OH radicals. For comparison, additional permeation simulations were performed with aquaporin incorporated into the lipid membrane. Intriguingly, it was observed that a small amount of OH radicals managed to traverse the aquaporin channel by forming hydrogen bonds with water.

研究分野：ソフトマター物理

キーワード：カーボンナノチューブ 反応力場 分子動力学シミュレーション OHラジカル 脂質膜 水の透過

1. 研究開始当初の背景

水を液体状態のまま融点以下まで冷やした過冷却水の性質を知ることは、生命科学など多くの分野で重要である。しかし、バルクの過冷却水は低温で結晶化してしまうため、その研究には困難が伴う。S.-H. Chen らのグループでは、水を細孔内に閉じ込めることによって結晶化を防ぎ、低温の過冷却水のダイナミクスを調べている[1,2]。それによると、緩和時間の温度依存性が変化する、**fragile-strong crossover** と呼ばれる動的クロスオーバー現象が観測され、2種類の水の存在が示唆されている。2種類の水の存在は、4℃密度極大など水の異常性を説明できると信じられているが、細孔内で見られた現象がバルク水でも同様に起こると結論づけるのは早計である。実際、複数の研究によって、閉じ込め水は界面からの距離で凝縮水(束縛水)と自由水に分けられることが報告されている[3,4]。凝縮水および自由水のダイナミクスと **fragile-strong crossover** との関係は、必ずしも明確ではない。界面の影響を精度良いシミュレーションで見積もることは大変重要であると考えられる。

一方で、直径 2-50nm の細孔が規則的に並んでいるメソポーラス材料は、幅広い応用の可能性を秘めていることから、産業応用的な観点からも近年注目を集めている。例えば、細孔径が生体分子の大きさに相当することからバイオ分野での応用が期待されている。バイオ分野での応用において、水の存在は非常に重要である。また、細孔表面の性質を変化させたときに細孔内の物質の構造とダイナミクスがどのように変化するかを知ることは、物質の選択的な分離や透過という観点から、工業的にも重要である。しかし、界面の性質をナノスケールレベルで制御したり、それに対応した物質の物性変化を追いかけることは、実験では難しく、分子シミュレーションが重要な役割を果たすと考えられる。

2. 研究の目的

細孔内の水の性質を精度よく評価するため、近年開発が進んでいる反応力場 **ReaxFF (Reactive Force Field)**[5]を用いて、化学反応を取り入れた分子動力学(MD)計算を行う。従来の MD で用いる分子力場では、原子間結合が固定されているため、化学反応を取り扱うことはできなかった。化学反応を正しく扱うためには、量子力学を取り入れた MD が必要だが、計算コストが膨大なため、現在でも限られた空間・時間スケールしか扱うことができず、現実的ではない。**ReaxFF** を用いることで、ナノスケール(nm, ns)の現象を、化学反応も含めて再現することができる。従来の MD よりも詳細に界面からの影響を評価することで、生命科学、地球科学、食品科学など様々な分野で重要となる水の性質、特に過冷却水の性質を正しく理解することを目指す。

3. 研究の方法

細孔としては、親水性のメソポーラスシリカと、疎水性のカーボンナノチューブ (CNT) を用いた。

ReaxFF ポテンシャルの精度は系に依存するが、シリカ+水の界面系はポテンシャルが十分に調整されている。その一方で、CNT のような炭素構造体と水の相互作用については、**ReaxFF** 計算が為されていない。そのため、精度がある程度保障されているメソポーラスシリカ中の水に関する MD を、まずは実行した。細孔径は 2.7 nm とし、MD 計算は LAMMPS で実行した。**ReaxFF** パラメータとして、2012 年に Pitman らによって提唱された力場[6]と、2015 年に Yeon らによって調整された力場[7]を採用し、比較した。水の水素結合に着目した解析を行なった。

次に、CNT 内の水について、Pitman[6]と Yeon[7]の力場に加えて、さらに2つの **ReaxFF** パラメータ[8, 9]を用いて、水の流入速度を比較した。細孔径 2.6 nm のアームチェア型単層 CNT を用い、MD 計算は LAMMPS で実行した。

CNT を利用した選択的な物質輸送の実現に資するため、リン脂質二重膜に CNT を埋め込んだ系で、OH ラジカルの透過を調べた。比較のため、生体内で水を透過させる役割のタンパク質、アクアポリンを用いた膜透過のシミュレーションも実行した。MD 計算は NAMD で実行し、分子力場は CHARMM36 および CGenFF を使用した。

4. 研究成果

まずメソポーラスシリカ内の水について、動径分布関数を計算したところ、Yeon の力場[7]が実験値とより近い結果を示した。さらに、水の拡散係数を計算したところ、2つの力場で2倍以上の差が見られた。Yeon の力場は細孔中心付近でバルク水と同程度の数値を示すが、Pitman の力場では極端に水の拡散が遅い。中性子準弾性散乱実験で細孔径 2.7 nm のメソポーラスシリカ内の水のダイナミクスについて調べられており、それによると、水のダイナミクスは速いモードと遅いモードに分けられ、速いモードはバルク水と同程度の拡散係数を示すことが分かっている。速いモードの水は、シリカ界面から離れた細孔中心付近に分布していると考えられることから、シミュレーションにおける Yeon の力場による結果が実験とはよく対応していると結論づけられる。以上から、メソポーラスシリカ内の水の性質を調べるのに、Yeon の力場が適している

と判断した。そこで、Yeon の力場を用いたシミュレーションで、水素結合のライフタイムが界面からの距離に対してどう変化するかを調べた。その結果、シラノール基と水の水素結合は、水-水の水素結合より強く、ライフタイムが長くなることが分かった。また、界面の粗さによって、水分子が長時間トラップされる様子も観測された。

次に、カーボンナノチューブ内の水の挙動を調べるため、4つの ReaxFF パラメータを用いて、水の流入・流出シミュレーションを実行した。まず CNT を水の中に入れて、水の流入する様子を観測したところ、4つのパラメータセットの中で最新の Zhang のパラメータ[9]では、CNT 内に水が流入しなかった。他の3つのパラメータのうち、Pitman の力場[6]と Monti の力場[8]では水が速やかに流入したが、Yeon の力場[7]では水の流入に時間がかかり、計算時間内で入口付近にしか入り込まなかった。次に、水分子を CNT 内に入れた状態からシミュレーションを開始すると、Zhang のパラメータでは水が流出したことから、CNT と水が斥力的に相互作用していることが分かった。実験で、水は CNT 内に流入することが知られているので、Zhang の力場は今回の計算にはふさわしくないと判断した。また、Monti の力場では CNT が壊れてしまったが、Pitman の力場では CNT の構造が安定していた。Yeon の力場では CNT の構造が少し歪んだが、壊れるまではいかなかった。以上のことから、Pitman の力場が最も適切であると判断した。ReaxFF を使用する際には、パラメータの精度を確認する必要があることが分かった。

CNT の産業利用として、膜への選択的透過を実現するために、リン脂質二重膜に単層 CNT を埋め込んだ系で、水および OH ラジカル透過を調べた。CNT の末端は水素で修飾されている。長時間のシミュレーションの結果、水は速やかに CNT 内に流入するが、OH ラジカルが自発的に流れ込む様子は見られなかった。比較のため、アクアポリンでの水と OH ラジカル透過シミュレーションを実行した。長時間のシミュレーションの結果、OH ラジカルはほとんどアクアポリンを通過しなかったが、水と水素結合して複合体を形成することで、アクアポリンを投下するラジカルもわずかながら観測された。続いて、OH ラジカルを引っ張ってアクアポリン中を透過させ、その際に受ける力を解析した。その結果、水チャンネルの入り口では斥力を受けるが、チャンネルに入ると引力により透過が促進されることが分かった。

参考文献

- [1] A. Faraone, L. Liu, C.-Y. Mou, C.-W. Yen, and S.-H. Chen, *J. Chem. Phys.* 121, 10843 (2004).
- [2] X.-Q. Chu *et al.*, *Phys. Rev. E* 76, 021505 (2007).
- [3] T. Yamada *et al.*, *J. Phys. Chem. B* 115, 13563 (2011).
- [4] P. Gallo, M. Rovere, and E. Spohr, *J. Chem. Phys.* 113, 11324 (2000).
- [5] A. C. T. van Duin *et al.*, *J. Phys. Chem. A* 105, 9396 (2001).
- [6] M. C. Pitman, A. C. T. van Duin, *J. Am. Chem. Soc.* 134, 3042 (2012).
- [7] J. Yeon and A. C. T. van Duin, *J. Phys. Chem. C* 120, 305 (2016).
- [8] S. Monti *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15, 15062 (2013).
- [9] W. Zhang and A. C. T. van Duin, *J. Phys. Chem. B* 122, 4083 (2018).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 T. Mizuguchi and T. Odagaki	4. 巻 35
2. 論文標題 Determination of cooperatively rearranging regions in a binary glass former	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 334003-1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-648X/acd50c	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 Mizuguchi Tomoko, Fukushima Naoto, Aoki Takashi, Fujiwara Susumu, Hashimoto Masato	4. 巻 9
2. 論文標題 The study on the stability of DNA structure by steered molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 160 ~ 169
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15748/jasse.9.160	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 T. Mizuguchi, S. Tatsumi, and S. Fujiwara	4. 巻 46
2. 論文標題 Icosahedral order in liquid and glassy phases of cyclohexane	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 721-726
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/08927022.2020.1757092	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 H. Li, S. Fujiwara, H. Nakamura, T. Mizuguchi, A. Nakata, T. Miyazaki and S. Saito	4. 巻 60
2. 論文標題 Structural change of damaged polyethylene by beta-decay of substituted tritium using reactive force field	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SAAB06-1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/abdc8	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 Mizuguchi Tomoko, Hagita Katsumi, Fujiwara Susumu, Yamada Takeshi	4. 巻 45
2. 論文標題 Hydrogen bond analysis of confined water in mesoporous silica using the reactive force field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 1437 ~ 1446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2019.1652740	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 Nakamura Hiroaki, Miyanishi Hisanori, Yasunaga Takuo, Fujiwara Susumu, Mizuguchi Tomoko, Nakata Ayako, Miyazaki Tsuyoshi, Otsuka Takao, Kenmotsu Takahiro, Hatano Yuji, Saito Shinji	4. 巻 59
2. 論文標題 Molecular dynamics study on DNA damage by tritium disintegration	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SAAE01 ~ SAAE01
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab460d	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 -

〔学会発表〕 計26件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 14件)

1. 発表者名 Haolun Li, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Shinji Saito and Wataru Sakai
2. 発表標題 Reactive molecular dynamics study on intermolecular structural changes of hydrogen-abstracted polyethylene chains
3. 学会等名 The 41st JSST Annual International Conference on Simulation TechnologyJSST2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryuta Kawanami, Susumu Fujiwara, Tomoko Mizuguchi, Yoshiteru Yonetani and Hiroaki Nakamura
2. 発表標題 Molecular dynamics study of microscopic mechanism of OH radical-induced DNA damage
3. 学会等名 The 41st JSST Annual International Conference on Simulation TechnologyJSST2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 LI HAOLUN・藤原 進・中村 浩章・水口 朋子・中田 彩子・宮崎 剛・齊藤 真司・坂井 互
2. 発表標題 真空中における損傷炭化水素の構造安定化に関する反応分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第70回高分子学会年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Naoto Fukushima, Takashi Aoki, Masato Hashimoto and Susumu Fujiwara
2. 発表標題 The study on the stability of DNA structure by steered molecular dynamics simulations
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haolun Li, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Shinji Saito and Wataru Sakai
2. 発表標題 Reactive molecular dynamics study on damaged polyethylene after hydrogen abstraction by radiation
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kento Ishiguro, Hiroaki Nakamura, Takuo Yasunaga, Susumu Fujiwara and Tomoko Mizuguchi
2. 発表標題 Effect of tritium beta decay in deoxy-D-ribose on double helix structure of telomeric DNA
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名	Susumu Fujiwara, Haolun Li, Ryuta Kawanami, Kazushi Terakawa, Tomoko Mizuguchi, Hiroaki Nakamura, Yoshiteru Yonetani, Kazumi Omata, Seiki Saito, Takuo Yasunaga, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Takao Otsuka, Takahiro Kenmotsu, Yuji Hatano and Shinji Saito
2. 発表標題	Tritium-induced damage on polymers and biopolymers: Molecular dynamics simulations and theoretical calculations
3. 学会等名	The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	Li Haolun・藤原 進・中村 浩章・水口 朋子・中田 彩子・宮崎 剛・齊藤 真司・坂井 互
2. 発表標題	真空中における損傷炭化水素の構造変化に関する反応分子動力学シミュレーション
3. 学会等名	第70回高分子討論会
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	Tomoko Mizuguchi, Takashi Aoki, Naoto Fukushima, Masato Hashimoto, and Susumu Fujiwara
2. 発表標題	The role of DNA sequence in the stability of double-stranded structure
3. 学会等名	AROB-ISBC-SWARM 2022 (国際学会)
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	Haolun Li, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Shinji Saito
2. 発表標題	Reactive Molecular Dynamics Simulations on Polyethylene Damaged by Tritium Disintegration
3. 学会等名	ISPlasma2021/IC-PLANTS2021 (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名 Haolun Li, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Wataru Sakai, Shinji Saito
2. 発表標題 Evaluation of Reactive Force Field on Simulating Damaged Polyethylene Chain by Substituted Tritium
3. 学会等名 The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-29) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中村浩章, 石黒健人, 藤原進, 水口朋子, 米谷佳晃, 安永卓生, 中田彩子, 宮崎剛, 大塚教雄, 剣持貴弘, 波多野雄治, 齊藤真司
2. 発表標題 DNAテロメア中デオキシDリボースのトリチウム 崩壊による構造変化のMD解析
3. 学会等名 第37回プラズマ・核融合学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 米谷 佳晃, 尾又 一実, 安永 卓生, 大谷 寛明, 齋藤 誠紀, 中田 彩子, 宮崎 剛, 大塚 教雄, 剣持 貴弘, 波多野 雄治, 齊藤 真司
2. 発表標題 高分子・生体分子への置換トリチウムの壊変効果に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 置換トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化に関する研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 LI HAOLUN, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司
2. 発表標題 真空中における損傷ポリエチレン一本鎖の構造安定化に関する反応分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 置換トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化に関する研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺川 和志, 川波 竜太, LI HAOLUN, 藤原 進, 水口 朋子, 米谷 佳晃, 中村 浩章
2. 発表標題 クラスター DNA 損傷の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 置換トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化に関する研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石黒 健人, 中村 浩章, 藤原 進, 水口 朋子, LI HAOLUN, 米谷 佳晃, 安永 卓生, 齋藤 誠紀, 中田 彩子, 宮崎 剛, 大塚 教雄, 剣持 貴弘, 波多野 雄治, 齊藤 真司
2. 発表標題 DNAシミュレーションに適用する反応力場 ReaxFFの比較
3. 学会等名 置換トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化に関する研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haolun Li · Susumu Fujiwara · Hiroaki Nakamura · Tomoko Mizuguchi · Ayako Nakata · Tsuyoshi Miyazaki · Shinji Saito
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study on Structural Change of Damaged Polyethylene by Beta-Decay of Substituted Tritium using Reactive Force Field
3. 学会等名 高分子学会第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 LI HAOLUN · 藤原 進、中村 浩章、水口 朋子、中田 彩子 · 宮崎 剛、齊藤 真司
2. 発表標題 置換トリチウムのベータ崩壊による損傷ポリエチレンの構造変化に関する反応力場分子動力学研究
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 LI HAOLUN・藤原 進・中村 浩章・水口 朋子・中田 彩子・宮崎 剛・齊藤 真司
2. 発表標題 反応力場を用いた置換トリチウムの崩壊による損傷ポリエチレンの構造変化に関する分子動力学研究
3. 学会等名 高分子学会第29回ポリマー材料フォーラム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 辰巳創一, 水口朋子, 野田泰斗, Zach Evenson, 藤原進
2. 発表標題 細孔中に拘束されたシクロヘキサンのダイナミクス
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Soichi Tatsumi, and Susumu Fujiwara
2. 発表標題 Icosahedral order in liquid and glassy phases of cyclohexane
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Katsumi Hagita and Susumu Fujiwara
2. 発表標題 Hydrogen bond analysis of confined water in mesoporous silica using the reactive force field
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Soichi Tatsumi and Susumu Fujiwara
2. 発表標題 Icosahedral order in liquid and glassy phases of cyclohexane
3. 学会等名 2019 International Workshop on Glass Physics in Beijing (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水口朋子、萩田克美、藤原進
2. 発表標題 メソポーラスシリカ中の水に関する反応分子動力学計算
3. 学会等名 プラズマシミュレーションシンポジウム2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Katsumi Hagita and Susumu Fujiwara
2. 発表標題 Hydrogen bond analysis of confined water in nanoporous silica using molecular dynamics simulations
3. 学会等名 APSMR 2019 Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoko Mizuguchi, Katsumi Hagita, Susumu Fujiwara and Takeshi Yamada
2. 発表標題 Hydrogen bond analysis of confined water in nanoporous silica using the reactive force field
3. 学会等名 XXVI Sitges Conference on Statistical Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------