

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：15301

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K14378

研究課題名（和文）第一原理計算と深層学習を用いた非平衡材料物性に関する分子動力学的研究

研究課題名（英文）Molecular dynamics study of non-equilibrium materials based on first-principles calculation and machine learning

研究代表者

三澤 賢明（Misawa, Masaaki）

岡山大学・自然科学学域・助教

研究者番号：00823791

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,400,000円

研究成果の概要（和文）：物質中の原子1つ1つの運動を計算する「分子動力学法」に基づくシミュレーション研究を実施し、研究代表者が主導して実施した研究課題について次の成果を得た：(1)機械学習を利用した先進的な手法を、衝撃圧縮下における構造材料の変形のシミュレーションに初めて適用することに成功した。(2)地球深部ダイナミクスに深く関連する珪酸塩鉱物における、圧力による特異な構造変化の性質を明らかにした。(3)様々な分野で産業応用されている機能性材料である表面処理炭酸カルシウムの構造を原子レベルで予測した。(4)半導体でありながら金属のような延性を示す硫化銀について、その優れた延性の起源を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

成果(1)により、非平衡性の強い現象に機械学習を用いた手法を適用可能であることが示されたことから、計算機シミュレーションによる材料科学研究の加速が期待される。成果(2)で得られた知見は、今後の地球深部のダイナミクスの研究の深化に寄与するものである。成果(3)は表面処理炭酸カルシウムを用いた様々な工業製品の高品質化に寄与する、将来の高度な研究の実現に繋がるものである。成果(4)はフレキシブルな半導体を用いた次世代エレクトロニクスに向けた高性能半導体材料開発の足がかりとなるものである。

研究成果の概要（英文）：We investigated non-equilibrium phenomena in various materials based on molecular dynamics simulations. The following results were obtained in the research period: (1) An advanced method using machine learning was successfully applied for the first time to simulate the deformation of silica under shock wave compression. (2) The atomistic mechanism of pressure-induced structural changes in silicate minerals, which are closely related to the dynamics of the Earth's deep interior, was clarified. (3) The atomistic structure of surface-treated calcium carbonate, a functional material with industrial applications in various fields, was predicted. (4) The origin of the excellent ductility of silver sulfide, which is a semiconductor with metal-like ductility, was clarified.

研究分野：計算材料物理学

キーワード：分子動力学法 第一原理計算 機械学習原子間相互作用ポテンシャル 塑性変形 表面・界面構造

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。

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

様々な材料における物理・化学現象の解明や優れた特性をもつ新たな材料の開発において、全原子レベルの計算機シミュレーションが果たす役割は大きい。とりわけ、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算により物質中の原子1つ1つの振る舞いを明らかにする第一原理分子動力学 (First-Principles Molecular Dynamics; FPMD) 法は、複雑な電子状態に起因する物性や化学反応を原子論的な観点から詳細に調べることが可能であり、極めて強力な手法の1つである。我々はこの FPMD 法を用いて、種々の物質における化学反応、相変態、塑性変形、拡散などの非平衡現象のメカニズムを原子論的スケールから明らかにする目的で研究を行っている。

FPMD 法は幅広い現象を高精度に再現することが可能である反面、計算コストが非常に大きいため、扱うことのできる原子数や時間スケールが強く制限されるという問題点がある。このため、巨大な分子からなる物質や、長い時間 (数百ピコ秒～ナノ秒以上) を要する構造変化・化学反応を FPMD 法で直接取り扱うのには困難が伴う。FPMD 法に近い精度を保ちながらより大規模のシミュレーションを実現すべく、これまでに様々な方面からのアプローチが考案されてきたが、その潮流の中で、人工ニューラルネットワークを用いた深層学習に基づいて原子の運動の追跡に必要な原子間相互作用を予測するという手法が登場した。この機械学習原子間相互作用ポテンシャル (Machine Learning Interatomic Potential; MLIP) を用いると、理論的には FPMD 法レベルの精度を保ちながら、FPMD 法よりも数千～数万倍以上も効率良く分子動力学シミュレーションを行うことが可能となる。これを機械学習分子動力学 (Machine Learning Molecular Dynamics; MLMD) 法と呼ぶ。研究開始当時は MLIP に関する技術は未だ発展途上であり、MLMD 法の適用先としては主に平衡状態近傍における現象や物性の解析が想定されていた。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、FPMD 法および MLMD 法を駆使して種々の物質における非平衡現象の原子論的メカニズムを明らかにすることである。また、同時に、MLIP の適用範囲を非平衡性の強い現象に拡張することで計算機シミュレーションによる材料科学研究の加速に寄与することを目指した。研究期間内に、以下に示す項目に関する課題を研究代表者が主導して実施した。

- (1) 衝撃圧縮によるシリカ ( $\text{SiO}_2$ ) の弾性および塑性変形を再現可能な MLIP の構築：  
本課題では MLIP の適用範囲を非平衡性の強い現象に拡張するため、シリカを対象物質として衝撃圧縮下における物質中の原子の挙動を再現可能な MLIP の構築を行なった。
- (2) ファヤライト ( $\text{Fe}_2\text{SiO}_4$ ) における圧力誘起非晶質化現象のメカニズム解明  
地球深部に存在する鉱物の1つであるファヤライトは、加圧によって熱に依らない非晶質化を起こすことが実験的に知られている。本課題ではこのファヤライトにおける圧力誘起非晶質化の原子論的メカニズムを調べた。
- (3) 表面処理カルサイト ( $\text{CaCO}_3$ ) における脂肪酸の吸着構造の解析  
カルサイトは接着剤・塗料・シーラントの添加物など、様々な工業製品の添加物として用いられている。カルサイトを脂肪酸分子により表面処理すると、これらの工業製品の物性をさらに改善・制御することが可能となる。本課題ではこの表面処理カルサイトにおける脂肪酸分子の吸着構造を調べた。
- (4) 硫化銀 ( $\text{Ag}_2\text{S}$ ) 半導体相が持つ延性の起源の解明  
硫化銀は半導体でありながら金属のような延性を持つことが知られており、将来のフレキシブルデバイスへの応用や、硫化銀を基にした新たな半導体材料の開発が期待されている。本課題では、この硫化銀の持つ優れた延性の起源を原子論的観点から調べた。

### 3. 研究の方法

前述の各項目における研究の方法を以下に示す。

- (1) 本課題では、まず FPMD 法を用いてクォーツ結晶における衝撃圧縮のシミュレーションを実施した。FPMD 法の実行には、Shimojo らによる「QXMD」パッケージを利用した。衝撃波を受けた物質中の原子の振る舞いを記述するためには Multi-Scale Shock Technique と呼ばれる手法を利用し、弾性波領域から塑性波領域にわたるいくつかの衝撃波速度における計算データを得た。次に、これらの計算データから抽出した原子配置とそれに対応するポテンシャルエネルギーなどの情報を教師データとして深層学習に用いることで MLIP を構築した。MLIP の構築には Artrith らによる「aenet」パッケージを独自に改良したものを利用した。標準的な方法ではポテンシャルエネルギーの情報を用いてパラメータのフィッティングを行うが、本研究ではこれに加えて原子にはたらく力や圧力の情報を教師データとして利用することで MLIP の性能向上を図った。完成した MLIP を用いてシリカの衝撃圧縮の MLMD を実行することで、衝撃圧縮下における弾性・塑性変形の再現精度および計算速度について検

討を行なった。

- (2) 本課題では FPMD 法を用いてファヤライト結晶における圧力誘起構造変化の様子を調べた。FPMD 法の実行には、Shimojo らによる「QXMD」パッケージを利用した。まず、常温 (300 K) 下で常圧 (0 GPa) から 120 GPa まで 10 GPa ずつ圧力を増やしながらかシミュレーションを継続することで、圧力誘起構造変化を生じさせた。その後、同様に 10 GPa ずつ減圧を行うことで変化後の構造を常圧に取り出した。加圧・減圧過程における動径分布関数、配位数の時間変化、および静的構造因子を解析することで構造変化のメカニズムに関する検証を行なった。また、melt-quenching 法によって作製したガラス状態との間で配位数を比較することで、通常非晶質相と加圧による非晶質相の構造的性質の違いについて検討を行なった。
- (3) 本課題では、まず FPMD 法および密度汎関数理論に基づく構造最適化計算によってカルサイト表面におけるステアリン酸分子の吸着構造について調べた。計算の実行には、Kresse らによる「VASP」パッケージを用いた。過去の実験的研究により、ステアリン酸によりカルサイトに表面処理を施すと、カルサイト表面にステアリン酸分子 2 本分の厚みをもつ付着物が生じることが確認されている。そこで、①カルサイト(104)表面-ステアリン酸界面、②ステアリン酸-ステアリン酸界面 それぞれの系における単位構造モデルを構築し、FPMD シミュレーションおよび構造最適化計算を実施し、結合距離およびポテンシャルエネルギーの観点から安定な吸着構造について検討を行なった。
- (4) 本課題では、FPMD 法を用いて硫化銀のせん断変形過程における構造的振る舞いを調べた。FPMD 法の実行には、Shimojo らによる「QXMD」パッケージを利用した。ある結晶面をある結晶軸方向に滑らせることで、計 6 種類のせん断変形のシミュレーションを実施し、変形過程における動径分布関数の変化を調べることで構造変化の性質を検討した。また、構造変化に対するサイズ効果を検証するため、経験的ポテンシャルを用いた大規模系に対するせん断変形のシミュレーションも実施した。

#### 4. 研究成果

前述の各項目における主な研究成果を以下に示す。

- (1) 図 1 に、本課題で実行した FPMD および MLMD 法によるクォーツ結晶の衝撃圧縮シミュレーションの結果と、実験結果との比較を示す。図 1(a)は衝撃圧縮下における粒子速度と衝撃波速度の関係を示しており、FPMD と MLMD の結果が概ね一致していることが分かる。一方で、実験結果と比較すると FPMD においてもやや大きな差異が見られることから、シリカにおける衝撃圧縮のシミュレーションを産業応用に役立てるためには衝撃圧縮挙動の再現のための手法自体を改善する必要がある。図 1(b)は圧力と比体積の関係を示しており、こちらも MLMD の再現精度が良好であることが見て取れる。以上の結果から、MLIP を非平衡性の強い現象である固体材料の衝撃圧縮に適用可能であることを実証することができた。なお、これらの結果はポテンシャルエネルギーのみを教師データに用いて構築した MLIP による、弾性波衝撃圧縮の領域における結果であり、衝撃圧縮による塑性変形は再現することができなかった。MLIP の学習方法の改良について検証を行なった結果、現在ではポテンシャルエネルギーに加えて原子にはたらく力と圧力を教師データに用いることで弾性-塑性遷移の挙動を再現可能となることを見出しているが、再現精度に関しては未だ改善の余地が残っており、パラメータの最適化も完了していないことを踏まえ、本報告書ではその詳細は割愛する。

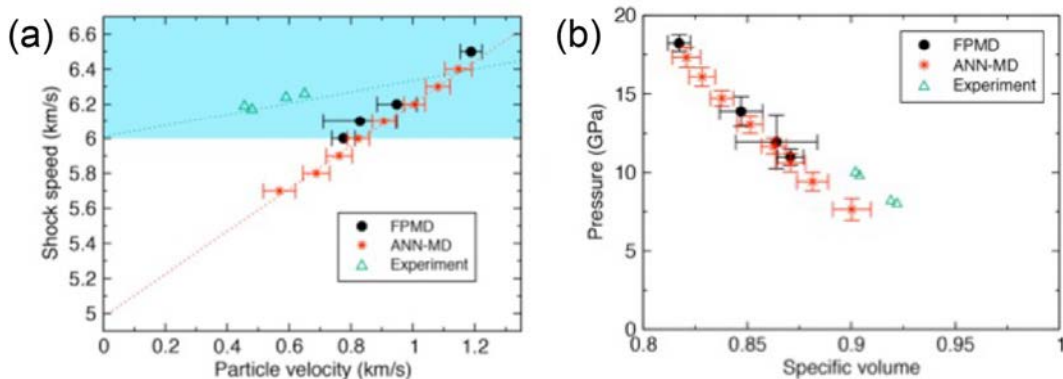


図 1 : MLMD によって得られた衝撃圧縮特性. (a)粒子速度と衝撃波速度の関係, (b)圧力と比体積の関係. ●, \*, および△はそれぞれ FPMD, MLMD, および実験による結果

(2) 図2に、ファヤライト結晶における圧力誘起構造変化のFPMDシミュレーションにより得られた、加圧および減圧過程における構成元素の配位数変化を示す。図2(a)は鉄と珪素の平均配位数の推移であり、加圧過程において100 GPa付近で珪素周りの配位数変化が生じていることが分かる。一方、鉄まわりの配位数は40 GPa前後から徐々に変化が生じていた。減圧後は、鉄はほぼ元の配位数に戻っていたのに対し、珪素の配位数は不可逆的な振る舞いを示した。図2(b)は珪素の配位数分布の推移であり、高圧化で生じた5、6配位の珪素が減圧後も一定割合残存していることを示している。また、得られた構造を加熱した後に徐冷すると、常圧では4配位の珪素が支配的であった。これらの結果から、圧力によって非晶質化したファヤライトは通常のガラス構造とは明確に異なる構造的特徴を有することが分かった。なお、実験的にはファヤライトは40 GPa前後で熱に依らない非晶質化を起こすことが知られており、本課題で得られた構造変化の様子とは食い違いがある。これはファヤライトの圧力誘起非晶質化が時間のかかる構造変化であり、計算コストの高いFPMD法では時間スケールが不足していたためだと考えられる。この問題を解決するためには、FPMD法の精度を保ちながら計算コストを大幅に削減できるMLMD法を適用することが有用であると考えられる。本課題で行なったFPMDシミュレーションにより、MLIP構築に必要な教師データは十分蓄積されており、今後はMLMD法を用いた詳細な構造変化メカニズムの解析が期待できる。

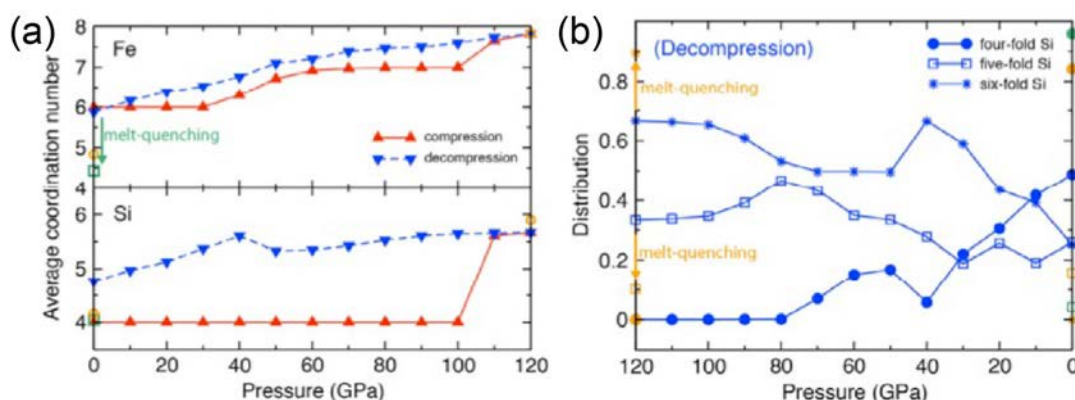


図2：加圧および減圧過程における配位数変化。(a)鉄（上段）および珪素（下段）の平均配位数の推移。▲と▼はそれぞれ加圧過程と減圧過程。(b)珪素の配位数分布の推移。●、□、および\*はそれぞれ4、5、および6配位の珪素の割合。

(3) ①カルサイト(104)表面に対してステアリン酸分子を1つ配置したモデルにおいて、常温(300 K)におけるFPMDシミュレーションを行なったところ、カルサイト表面にステアリン酸の疎水基を向けた場合はステアリン酸分子が徐々に表面から解離していったのに対し、親水基を向けた場合はカルサイト表面のカルシウム原子とステアリン酸末端の酸素原子の距離が一定に保たれるという結果が得られた。このことから、ステアリン酸の親水基をカルサイトに向けた場合にのみ表面吸着が起こることが分かった。②2本のステアリン酸の末端を向かい合わせたモデルにおいて構造最適化計算を行なったところ、親水基同士を向かい合わせたモデルが最もエネルギー的に安定であった。さらに、疎水基同士を向かい合わせた場合と、疎水基と親水基を向かい合わせた場合は、分子がそれぞれ単独で存在する場合よりもエネルギーが高い、すなわち不安定であるという結果が得られた。以上の結果と、カルサイト表面においてステアリン酸が2層積層した状態で存在するという実験的事実から、親水基をカルサイトに向けて吸着しているステアリン酸分子の中に一部反転している分子が存在する、というモデルを提案した。この反転している分子の存在により、2層目のステアリン酸が安定に積層可能となると考えている。モデルの妥当性を検証するため、平面上に9本のステアリン酸分子を配列させた4つのモデルを作成し、エネルギーを比較した(図3)。4つのモデルのうち2つは反転した分子を1本導入し(図3(c),(d))、さらに2つはステアリン酸の結晶構造を反映し、平面に対して斜め方向に配列させた(図3(b),(d))。結果、一部の分子を反転させたモデルもエネルギー的には十分存在し得ることが示された。これらの結果を踏まえ、現在はカルサイト表面にステアリン酸と水を配置した大規模モデルを構築し、経験的ポテンシャル関数を用いたシミュレーションにより水の拡散性への影響の調査を試みている。



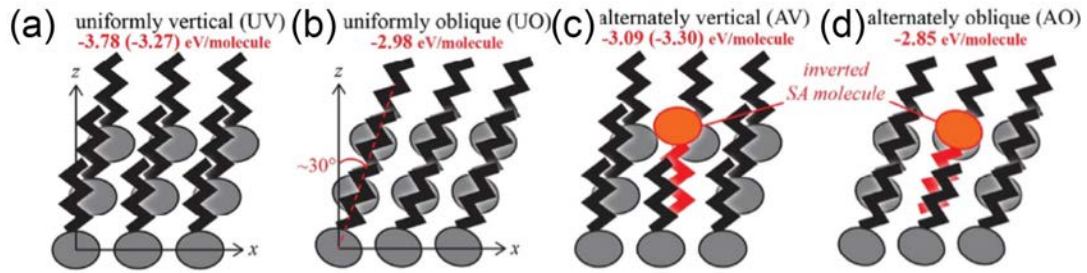


図3：平面上に配列したステアリン酸のエネルギー比較. (a)同じ方向かつ垂直な配列. (b)同じ方向かつ斜めの配列. (c)一部が反転かつ垂直な配列. (d)一部が反転かつ斜めの配列.

(4) 図4に、せん断変形過程における動径分布関数の変化を示す. 結晶状態においては、4~5 Å付近に2つ、7Åと8Å付近にそれぞれ1つのピークが存在する（青）が、これらのピークはせん断ひずみが大きくなるにつれて消失する. しかし、ピークが消失した後も引き続き変形を加えていくと、ある時点で結晶状態を特徴付けるピークが復元するという振る舞いが見られた（赤）. これはせん断変形過程において硫化銀が塑性変形を経て元の結晶構造に戻るといふ振る舞いを示す結果であり、硫化銀が結晶構造を保ちながら延性変形をしていることを示唆している. また、このような構造回復は硫化銀と類似した組成をもつセレン化銀 ( $\text{Ag}_2\text{Se}$ ) では観測されなかった. これらの構造回復が生じる点における原子の振る舞いを詳しく観察したところ、特定の結晶面内で原子の集団的な滑りが生じることで、せん断により生じたひずみが解消され、結晶内に存在する硫黄副格子の構造が復元されていることが明らかとなった. さらに、硫化銀の結晶構造を詳しく解析したところ、硫化銀の結晶中に存在する硫黄副格子は BCC ライクな高い対称性を持っていることが判明した. 構造回復の起こらなかったセレン化銀にはこのような対称性の高い副格子の構造が見られなかったこと、そして金属においても BCC 型の構造を持つものが優れた延性を示す傾向があることから、我々はこの硫黄副格子の対称性が硫化銀の延性の起源であると結論付けた. 今後は、本課題で蓄積された FPMD の計算データを利用して MLIP を構築することで、大規模系におけるより詳細な解析を実施していく予定である.

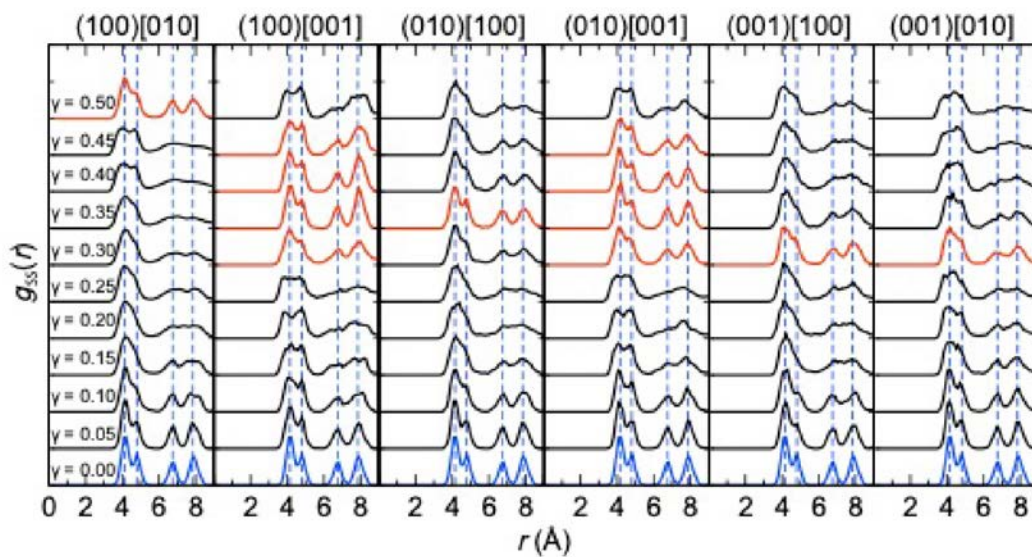


図4：せん断変形過程における動径分布関数の変化.  $\gamma$  はひずみ率,  $(KLM)[klm]$  は,  $(KLM)$ 面を  $[klm]$ 方向に滑らせるせん断変形を表す.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Suzuki Hiroo, Liu Yijun, Misawa Masaaki, Nakano Chiyu, Wang Yingzhe, Nakano Ryo, Ishimura Kentaro, Tsuruta Kenji, Hayashi Yasuhiko	4. 巻 -
2. 論文標題 Intermediate State between MoSe <sub>2</sub> and Janus MoSeS during Atomic Substitution Process	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nano Letters	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) 10.1021/acs.nanolett.3c00972	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 Suzuki Hiroo, Kishibuchi Misaki, Misawa Masaaki, Shimogami Kazuma, Ochiai Soya, Kokura Takahiro, Liu Yijun, Hashimoto Ryoki, Liu Zheng, Tsuruta Kenji, Miyata Yasumitsu, Hayashi Yasuhiko	4. 巻 -
2. 論文標題 Self-Limiting Growth of Monolayer Tungsten Disulfide Nanoribbons on Tungsten Oxide Nanowires	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Nano	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) 10.1021/acsnano.3c01608	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 Misawa Masaaki, Hokyo Hinata, Fukushima Shogo, Shimamura Kohei, Koura Akihide, Shimojo Fuyuki, Kalia Rajiv K., Nakano Aiichiro, Vashishta Priya	4. 巻 12
2. 論文標題 Defect-free and crystallinity-preserving ductile deformation in semiconducting Ag <sub>2</sub> S	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-24004-z	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 Machida Narumi, Misawa Masaaki, Kezuka Yuki, Tsuruta Kenji	4. 巻 20
2. 論文標題 First-principles Analysis of Stearic Acid Adsorption on Calcite (104) Surface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 261 ~ 265
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2022-041	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 Suzuki Hiroo, Hashimoto Ryoki, Misawa Masaaki, Liu Yijun, Kishibuchi Miki, Ishimura Kentaro, Tsuruta Kenji, Miyata Yasumitsu, Hayashi Yasuhiko	4. 巻 16
2. 論文標題 Surface Diffusion-Limited Growth of Large and High-Quality Monolayer Transition Metal Dichalcogenides in Confined Space of Microreactor	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Nano	6. 最初と最後の頁 11360 ~ 11373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnano.2c05076	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 MISAWA Masaaki, SHIMAMURA Kohei, SHIMOJO Fuyuki	4. 巻 31
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of Shock Compression Behavior Based on First-Principles Calculation and Machine-Learning	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Review of High Pressure Science and Technology	6. 最初と最後の頁 132 ~ 139
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4131/jshpreview.31.132	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 三澤賢明, 島村孝平, 下條冬樹	4. 巻 56
2. 論文標題 第一原理計算と機械学習による固体材料における衝撃圧縮特性の分子動力学解析	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 セラミックス	6. 最初と最後の頁 674-677
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 Misawa Masaaki, Fukushima Shogo, Koura Akihide, Shimamura Kohei, Shimojo Fuyuki, Tiwari Subodh, Nomura Ken-ichi, Kalia Rajiv K., Nakano Aiichiro, Vashishta Priya	4. 巻 11
2. 論文標題 Application of First-Principles-Based Artificial Neural Network Potentials to Multiscale-Shock Dynamics Simulations on Solid Materials	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4536 ~ 4541
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c00637	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 Misawa Masaaki, Shimojo Fuyuki	4. 巻 257
2. 論文標題 First Principles Study of Pressure Induced Amorphization of Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> Fayalite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2000173 ~ 2000173
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202000173	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 Hada Masaki, Abdullah Al Asad Md., Misawa Masaaki, Hasegawa Yoichi, Nagaoka Ryota, Suzuki Hiroo, Mishima Ryuji, Ota Hiromi, Nishikawa Takeshi, Yamashita Yoshifumi, Hayashi Yasuhiko, Tsuruta Kenji	4. 巻 117
2. 論文標題 A mechanistic investigation of moisture-induced degradation of methylammonium lead iodide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 253304 ~ 253304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0021338	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28件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 橋本龍季, 三澤賢明, 鶴田健二, 宮田耕充, 林靖彦, 鈴木弘朗
2. 発表標題 マイクロリアクタ内の閉じ込め空間制御による遷移金属ダイカルコゲナイドのミリスケール化と面内ヘテロ成長
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 森隼平, 三澤賢明, 鶴田健二
2. 発表標題 表面処理を施した酸化物ナノ界面における液体粘性挙動に関する分子動力学シミュレーション
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 劉怡君, 石村拳太郎, 中野亮, 三澤賢明, 鶴田健二, 林靖彦, 鈴木弘朗
2. 発表標題 プラズマ処理によるヤーヌスMoSeSの生成ダイナミクスと電子状態遷移過程の解明
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 橋本龍季, 三澤賢明, 鶴田健二, 宮田耕充, 林靖彦, 鈴木弘朗
2. 発表標題 閉じ込め空間による大面積・高品質単層二硫化タングステンの表面拡散律速成長と光電子デバイス応用
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三澤賢明, 三谷佳一, 大村訓史, 鶴田健二
2. 発表標題 Si,P共添加型アモルファス酸化鉄のリング構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoki Hashimoto, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta, Yasumitsu Miyata, Yasuhiko Hayashi, Hiroo Suzuki
2. 発表標題 Growth of Large and High-Quality Monolayer WS <sub>2</sub> in Confined Space of Substrate-stacked Microreactor
3. 学会等名 The 63rd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yijun Liu, Kentarou Ishimura, Ryo Nakano, Masaaki Misawa, Kenji Tsuruta, Yasuhiko Hayashi, Hiroo Suzuki
2. 発表標題 Generation Process Investigation of Janus MoSeS by Repeated Plasma Treatments
3. 学会等名 The 63rd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hinata Hokyō, Masaaki Misawa, Akihide Koura, Kohei Shimamura, Fuyuki Shimojo
2. 発表標題 Ab initio simulation for the ductility mechanism of silver chalcogenides
3. 学会等名 The 18th International Conference on Liquid and Amorphous Metals (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森隼平, 三澤賢明, 鶴田健二
2. 発表標題 水-酸化ナノ界面における粘性挙動に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 2022年度応用物理・物理系学会中国四国支部支部合同学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 劉怡君, 石村拳太郎, 中野亮, 三澤賢明, 鶴田健二, 林靖彦, 鈴木弘朗
2. 発表標題 ヤーヌスMoSeS生成に向けたプラズマ処理の検討と生成過程解明
3. 学会等名 2022年度応用物理・物理系学会中国四国支部支部合同学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 橋本龍季, 三澤賢明, 鶴田健二, 宮田耕充, 林靖彦, 鈴木弘朗
2. 発表標題 マイクロリアクタによる大面積・高品質単層二硫化タングステンの合成と光電子デバイス応用
3. 学会等名 2022年度応用物理・物理系学会中国四国支部支部合同学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masaaki Misawa, Tsuyoshi Endo, Kenji Tsuruta, Fuyuki Shimojo
2. 発表標題 Molecular dynamics study on plastic deformation of silica and silicate materials
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2022年大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masaaki Misawa, Kohei Shimamura, Fuyuki Shimojo
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Shock-Induced Structural Transformation of Silica Using Artificial Neural Network
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2021年大会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 町田成海, 三澤賢明, 毛塚雄己, 鶴田健二
2. 発表標題 カルサイト(104)表面におけるステアリン酸の吸着に関する第一原理解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期(第169回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三澤賢明, 福島省吾, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 衝撃圧縮下におけるシリカの弾性および塑性変形に適用可能な人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルの構築
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 法橋陽, 福島省吾, 三澤賢明, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 第一原理分子動力学法によるせん断応力下におけるAg <sub>2</sub> S <sub>1-x</sub> Se <sub>x</sub> の構造回復機構II
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高良明英, 福島省吾, 三澤賢明, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた銀カルコゲナイドの圧力誘起構造変化
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Narumi Machida, Masaaki Misawa, Yuki Kezuka, Kenji Tsuruta
2. 発表標題 First-principles analysis of stearic acid adsorption on calcite (104) surface
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shogo Fukushima, Aiichiro Nakano, Rajiv K. Kalia, Priya Vashishta, Fuyuki Shimojo, Hiroyuki Kumazoe, Masaaki Misawa, Kohei Shimamura, Akihide Koura
2. 発表標題 Size-Dependent Melting Temperature of Rubidium: Thermodynamic Integration Based on First-principles Calculations
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三澤賢明, 大村訓史, 下條冬樹, 鶴田健二
2. 発表標題 水分子挿入に伴うヨウ化鉛メチルアンモニウムの構造劣化に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 法橋陽, 三澤賢明, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 第一原理分子動力学法によるせん断応力下におけるAg <sub>2</sub> S <sub>1-x</sub> Se <sub>x</sub> の構造回復機構III
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 町田成海, 三澤賢明, 鶴田健二
2. 発表標題 人工ニューラルネットワークを用いた分子動力学における原子間ポテンシャルの精度向上
3. 学会等名 2020年度応用物理・物理系学会中国四国支部合同学術講演会
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 法橋陽, 福島省吾, 三澤賢明, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 せん断応力下におけるAg <sub>2</sub> S <sub>1-x</sub> Sexの第一原理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
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 三澤賢明, 下條冬樹
2. 発表標題 アモルファスFe <sub>2</sub> Si <sub>04</sub> の構造と電子状態に関する第一原理的研究
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 高良明英, 福島省吾, 三澤賢明, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた銀カルコゲナイドの圧力誘起構造変化
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 法橋陽, 福島省吾, 三澤賢明, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹
2. 発表標題 第一原理分子動力学法によるせん断応力下におけるAg <sub>2</sub> S <sub>1-x</sub> Sexの構造回復機構
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三澤賢明, 福島省吾, 高良明英, 島村孝平, 下條冬樹, Ken-ichi Nomura, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, Priya Vashishta
2. 発表標題 人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いたシリカの衝撃圧縮シミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hinata Hokyo, Masaaki Misawa, Shogo Fukushima, Kohei Shimamura, Akihide Koura, Fuyuki Shimojo
2. 発表標題 First-Principles Study of Microscopic Mechanism of High Ductility of Silver Sulfide/Selenide
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021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		
米国	南カリフォルニア大		