

平成 29 年 5 月 10 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26249011

研究課題名(和文) 超低摩擦技術開発のための量子化学に基づく「なじみ」と「焼付き」の理論基盤の構築

研究課題名(英文) Establishment of Theoretical Basis on Running-in and Seizure Based on Quantum Chemistry for Super-low Friction Technology Development

研究代表者

久保 百司 (Kubo, Momoji)

東北大学・金属材料研究所・教授

研究者番号：90241538

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 24,800,000円

研究成果の概要(和文)：開発した第一原理分子動力学法とTight-Binding量子分子動力学法に基づくトライボ化学反応シミュレータを活用し、窒化炭素膜、炭化ケイ素膜などの多様な潤滑膜におけるなじみと焼付きのメカニズム解明を実現し、焼付き防止策を理論的に提言した。また潤滑膜によってトライボ化学反応が大きく異なることを明らかにした。さらに当初の予定には無い、より大規模計算が可能なReaxFF分子動力学法に基づくトライボ化学反応シミュレータも開発した。計算によって明らかにされたなじみと焼付き現象は実験的にも検証された。さらに、なじみと焼付きの先にある摩耗の理論的解明と摩耗防止策の提言にも成功し、計画以上の成果が得られた。

研究成果の概要(英文)：By using tribochemical reaction simulators based on our developed first-principles and tight-binding quantum chemical molecular dynamics methods, the mechanisms of running-in and seizure on various lubricating films were elucidated and the prevention method of seizure was successfully proposed. We also clarified that tribochemical reactions strongly depend on the lubricating films. Furthermore, we successfully developed a new tribochemical reaction simulator based on ReaxFF molecular dynamics method for larger system. Clarified running-in and seizure phenomena by our simulations were good agreement with the experimental observations and then the accuracy of the simulation methodologies is verified. Furthermore, wear phenomena after the running-in and seizure were also clarified by our simulations and we successfully proposed the prevention method of wear. Finally we concluded that these outcomes are more than planned results.

研究分野：計算科学

キーワード：超低摩擦 量子化学 トライボロジー なじみ 焼付き

1. 研究開始当初の背景

近年、省エネルギー対策、地球温暖化対策に対する強い要請から、自動車、航空機、家電、情報機器、産業用ロボットをはじめとする機械産業において、エネルギーの利用効率を極限まで高めることが強く求められている。その実現に向けて、超低摩擦技術の実現が社会的に急務の課題となっている。具体的に、自動車における全エネルギー損失の約20%は摩擦に起因し、機械機器の故障や寿命の原因の約75%が摩擦により引き起こされる摩耗に起因している。また、超低摩擦技術は自動車分野のみならず、あらゆる機械産業分野、生活環境においてエネルギーの効率的利用と地球温暖化ガスの排出削減、さらには安全・安心社会の実現のために、その具体化が切望されている。特に、上記課題には迅速な対応が求められることから、実験研究に加え理論的な設計手法の確立が望まれている。

2. 研究の目的

トライボロジー分野においては、実験研究者の間では、「なじみ」と「焼付き」の制御が超低摩擦技術の実現に必須であると広く認識されているが、これまでのシミュレーション技術では、「なじみ」と「焼付き」といった実験現場で起こる非常に泥臭く、最もサイエンスから遠い現象を扱うことは不可能であると考えられてきた。しかし、研究代表者は、トライボ化学反応ダイナミクスを解明可能な量子分子動力学法を世界に先駆けて開発することで、「なじみ」と「焼付き」の原点はトライボ化学反応にあり、最もサイエンスよりの量子化学によって解明可能であるとの予備的知見を得た。そこで本研究では、当研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータと Tight-Binding 量子分子動力学シミュレータを活用することで、トライボロジー分野において「なじみ」と「焼付き」の理論基盤と学理を構築することを目的とした。さらに、この理論基盤を基に、超低摩擦技術を実現するための理論的設計を実現することも目的とした。

3. 研究の方法

第一原理分子動力学計算には、当研究室で開発した GFT (Gaussian & Fourier Transform) 法に基づく Violet を使用した。本プログラムは Gaussian タイプの基底関数を使用し、長距離成分であるクーロン力の計算にフーリエ変換を活用することで高速化を実現したものである。Tight-Binding 量子分子動力学計算には当研究室で開発した Colors を使用した。また、第一原理分子動力学計算には、精度検証のために平面波を基底関数として用いる CPMD も併用した。

さらに、計画当初の予定にはなかったが、より大規模系の計算を実現するために、古典分子動力学法に基づきながら化学反応を取り扱うことが可能な ReaxFF 力場に基づくト

ライボ化学反応シミュレータ LASKYO を開発し、本研究に用いた。

4. 研究成果

(1) 第一原理分子動力学法による窒化炭素膜のトライボ化学反応ダイナミクス

パラメータフリーの高精度計算手法である第一原理分子動力学法を活用し、窒化炭素膜の水による「なじみ過程」の検討を行った(図1)。その結果、水がトライボ化学反応を起こし、表面が水酸基と水素で終端される化学反応ダイナミクスを明らかにした。さらに、水酸基と水素で終端されることで「焼付き」を防止できることを明らかにした。

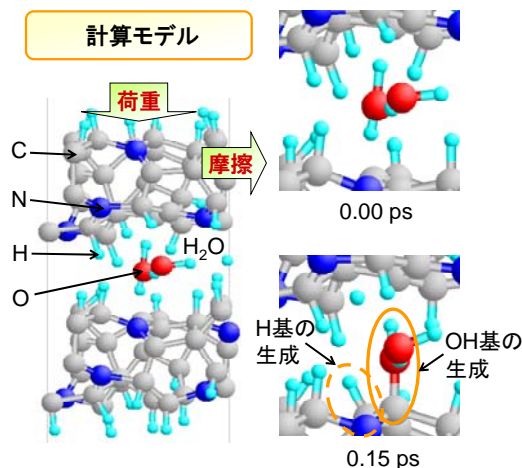


図1 窒化炭素膜の水によるなじみ過程のトライボ化学反応ダイナミクス

(2) 第一原理分子動力学法による炭化ケイ素膜のトライボ化学反応ダイナミクス

材料によるトライボ化学反応ダイナミクスの違いを明らかにするために、炭化ケイ素膜の水による「なじみ過程」の検討を、第一原理分子動力学法を用いて行った。その結果、窒化炭素膜と同様に水がトライボ化学反応を起こし、表面が水酸基と水素で終端される化学反応を明らかにした。さらに、高荷重下ではトライボ化学反応が加速され、Si-O-Si結合が形成されることを明らかにした(図2)。

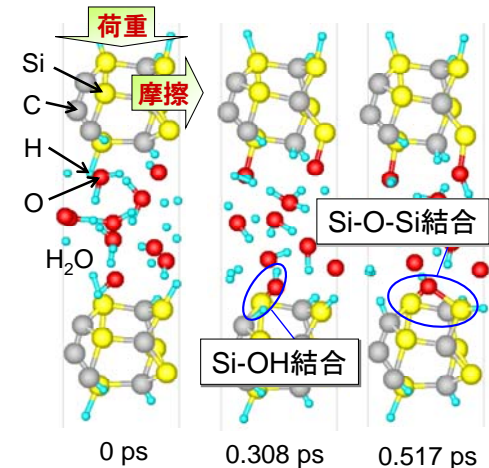


図2 炭化ケイ素膜の水によるなじみ過程のトライボ化学反応ダイナミクス

ここで、(1)で検討した窒化炭素膜においては、このような表面における酸化層の形成は確認されなかったことから、材料によって「なじみ過程」における化学反応ダイナミクスが大きく異なることが明らかにされた。さらに、炭化ケイ素膜の水による「なじみ過程」に関して、実験的にも検討を行い、Si-O-Si結合の形成は実験的にも観察された。

(3)Tight-Binding 量子分子動力学法による窒化ケイ素膜のトライボ化学反応ダイナミクス

第一原理分子動力学法よりも大規模計算が可能な Tight-Binding 量子分子動力学法を活用することで、窒化ケイ素膜の水による「なじみ過程」の検討を行った。その結果、水がトライボ化学反応を起こし、表面水酸基と水素で終端される化学反応ダイナミクスを明らかにした。さらに高荷重下ではトライボ化学反応が加速され、Si-O-Si結合が形成されることも明らかにした(図3)。また、窒化ケイ素中の窒素原子はNH₃として膜中から脱離することで、SiO₂膜の形成が促進されることも明らかにした。さらに、(2)で検討を行った炭化ケイ素膜においても同様のSi-O-Si結合が形成されるが、窒化ケイ素膜の方が、反応速度が速いことも明らかにした。窒化ケイ素膜の方が炭化ケイ素膜よりもトライボ化学反応速度が速いことは実験的にも検証された。さらに、水分子から解離した水素原子が窒化ケイ素膜の内部に侵入するダイナミクスが観察され、この水素原子によって、Si-N結合の切断が引き起こされることが、摩耗の原因となることも明らかにされた。窒化ケイ素膜が摩擦によって摩耗する現象は、実験的にも観察され、計算結果と良い一致を得た。

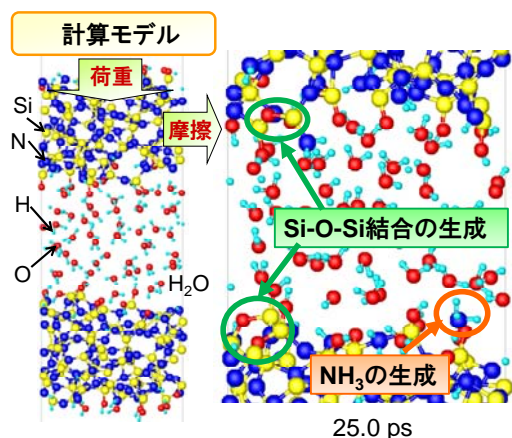


図3 窒化ケイ素膜の水によるなじみ過程のトライボ化学反応ダイナミクス

(4)第一原理分子動力学法による SiO₂ 膜のトライボ化学反応ダイナミクス

上記の(2)と(3)において、炭化ケイ素膜、窒化ケイ素膜の水による「なじみ過程」においてSi-O-Si結合が形成され、SiO₂膜が形成されることを明らかにした。そこで、この形

成された SiO₂ 膜と水とのトライボ化学反応ダイナミクスについて第一原理分子動力学法を用いて検討を行った。その結果、高荷重下において水と SiO₂ 膜のトライボ化学反応によって、上下の基板間をまたぐ Si-O-Si 結合が生成する「焼付き」現象が起こるとともに、トライボ化学反応が進むと、この2つの基板間をまたぐ Si-O-Si 結合と水の化学反応により SiO₂ 膜の摩耗が起こる現象を明らかにした。このような炭化ケイ素膜、窒化ケイ素膜の表面に形成された SiO₂ 膜の摩耗の発生は実験的にも観察された。

(5)ReaxFF 力場に基づく分子動力学法による SiO₂ 膜のトライボ化学反応ダイナミクス

Tight-Binding 量子分子動力学法よりも大規模計算が可能な ReaxFF 分子動力学法に基づくトライボ化学反応シミュレータを開発し、第一原理分子動力学法や Tight-Binding 量子分子動力学法では不可能な、表面の凹凸形状を反映した大規模モデルを作成し、検討を行った(図4)。その結果、表面の凹凸が衝突することによって、上下の基板間をまたぐ Si-O-Si 結合が生成する「焼付き」現象が観察され、さらにこの Si-O-Si 結合と水の化学反応により Si(OH)₄ などが生成し、SiO₂ 膜が摩耗する現象を明らかにした。さらに、小規模モデルでは検討不可能であった、衝突によってトライボ膜自体が塑性変形する現象も明らかにした。このような表面の凹凸形状を考慮した大規模モデルでのトライボ化学反応計算が可能になったことで、今後、トライボ膜の亀裂生成、摩耗、さらにはテキスチャの効果などの研究を進めるための土台を構築することに成功した。

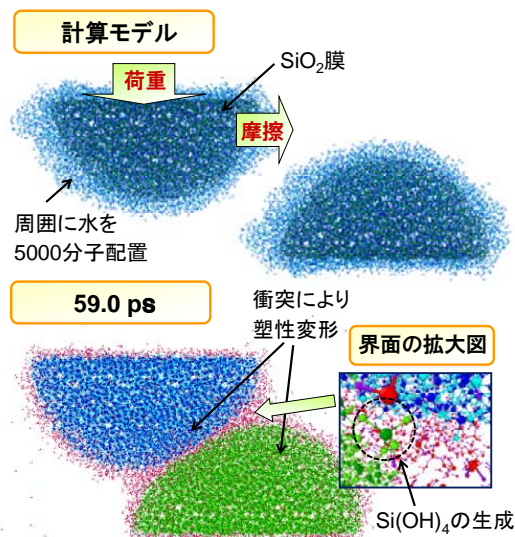


図4 表面凹凸を有する SiO₂ 膜の水とのトライボ化学反応ダイナミクス

また、(2)-(4)の結果より炭化ケイ素膜、窒化ケイ素膜の「なじみ過程」において、水が少量の場合には、表面が水酸基と水素で終端されるために、低摩擦が実現されるが、水が増えると表面に SiO₂ 膜が形成されると

もに摩擦が起こり、さらに水が増えると2つの基板間の直接接触が起こらないために摩擦が起こらないという、横軸に水分量、縦軸に摩擦量をとるとグラフが火山型の形状を示すことを提言した。この傾向は実験的にも確認された。

(6) Tight-Binding 量子分子動力学法による油潤滑におけるトライボ化学反応ダイナミクス

(1)-(5)における水によるなじみ過程の検討に加え、油潤滑プロセスについても Tight-Binding 量子分子動力学法を活用した検討を行った。その結果、摩擦低減剤である Mo-DTC 分子から MoS₂ 潤滑被膜が形成される過程のトライボ化学反応ダイナミクスを明らかにすることに成功した。さらに形成された MoS₂ 潤滑被膜に酸素原子が侵入することで、焼付き現象が起こり、摩擦係数が上昇することを明らかにした。

(7) 実験的に「摩擦の濡れ性分布」を評価する新しい評価手法の開発

炭化ケイ素膜、窒化ケイ素膜の水とのトライボ化学反応において共通な Si-O-Si 結合の形成は摩擦面の濡れ性を大きく変化させることから、摩擦面の濡れ性分布を評価する新しい実験評価手法を開発した。その結果、摩擦を負荷することで表面の濡れ性は摩擦初期と比較し、摩擦面のほぼ全域において大幅に増加すること、摩擦時の荷重の増加に伴い摩擦面の濡れ性は面内において不均一に減少すること、焼付き直後の摩擦面は初期表面と同等の濡れ性を示すことなどを明らかにした。

(8) 結論

以上の結果より、トライボロジー分野における「なじみ」過程のメカニズムの解明を実現するとともに「焼付き」を防止する方法を提言することに成功した。また、材料の種類によってトライボ化学反応が大きく異なることを明らかにした。さらに当初の予定には無い、より大規模な計算が可能な ReaxFF 分子動力学法に基づくトライボ化学反応シミュレータ LASKYO の開発にも成功した。また、実験的にも当初の予定にはない、摩擦面の濡れ性分布を評価する方法を開発するとともに、シミュレーション結果と良い整合性を得た。さらに本研究課題では、「なじみと焼付き」現象の解明を主目的としたが、さらにその先にある「摩擦現象」の理論的解明と「摩擦」の防止策の提言にも成功し、当初の計画以上の研究成果が得られた。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 12 件)

① M. I. De Barros Bouchet, J. M. Martin, J. Avila, M. Kano, K. Yoshida, T. Tsuruda, S. Bai, Y. Higuchi, N. Ozawa, M. Kubo, and M. C. Asensio, Diamond-Like Carbon Coating under

Oleic Acid Lubrication: Evidence for Graphene Oxide Formation in Superlow Friction, *Sci. Rep.*, 査読有, 7, 2017, 46394.

DOI: 10.1038/srep46394

② S. Bai, J. Xu, Y. Higuchi, N. Ozawa, K. Adachi, S. Mori, K. Kurihara, and M. Kubo, Computational Study on Low Friction Mechanism of Diamond-Like Carbon Induced by Oxidation Reaction, *Proc. 16th Intern. Conf. Nanotech.*, 査読有, 2016, 941-943.

DOI: 10.1109/NANO.2016.7751361

③ Y. Higuchi and M. Kubo, Large-Scale Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation Based on MPI Parallel Computing: Mechanical Properties of Polymers in Molecular Scale, *HPCS Series*, 査読有, 2016, 9-14.

https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=163671&item_no=1&page_id=13&block_id=8

④ K. Kawaguchi, H. Ito, T. Kuwahara, Y. Higuchi, N. Ozawa, and M. Kubo, Atomistic Mechanisms of Chemical Mechanical Polishing of a Cu Surface in Aqueous H₂O₂: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 査読有, 8, 2016, 11830-11841.

DOI: 10.1021/acsami.5b11910

⑤ Y. Higuchi and M. Kubo, Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Void Growth Process in the Block Structure of Semicrystalline Polymers, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 査読有, 24, 2016, 055006.

DOI: 10.1088/0965-0393/24/5/055006

⑥ H. Ito, T. Kuwahara, K. Kawaguchi, Y. Higuchi, N. Ozawa, and M. Kubo, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Elucidation of Chemical Reaction Dynamics in SiC Etching with SF₆/O₂ Plasma, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 査読有, 18, 2016, 7808-7819.

DOI: 10.1039/c5cp06515a

⑦ T. Kuwahara, H. Ito, K. Kawaguchi, Y. Higuchi, N. Ozawa, and M. Kubo, Origin of Chemical Order in a-Si_xC_yH_z: Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics and Statistical Thermodynamics Calculations, *J. Phys. Chem. C*, 査読有, 120, 2016, 2615-2627.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08561

⑧ Y. Higuchi, T. Ishikawa, N. Ozawa, L. Chazeau, J.-Y. Cavaille and M. Kubo,

Different Dynamic Behaviors of the Dissociation and Recombination Reactions in a Model Calculation of Polyethylene by First-Principles Steered Molecular Dynamics Simulation, Chem. Phys., 査読有, 459, 2015, 96-101.

DOI: 10.1016/j.chemphys.2015.08.007

- ⑨ Q. Zhang, D.F. Diao, and M. Kubo, Nanoscratching of Multi-Layer Graphene by Molecular Dynamics Simulations, Tribology Intern., 査読有, 88, 2015, 85-88.
DOI:10.1016/j.triboint.2015.03.004
- ⑩ T. Kuwahara, H. Ito, K. Kawaguchi, Y. Higuchi, N. Ozawa, and M. Kubo, The Reason Why Thin-Film Silicon Grows Layer by Layer in Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition, Sci. Rep., 5, 2015, 9052.
DOI: 10.1038/srep09052
- ⑪ H. Murabayashi, T. Tsuruda, Y. Wang, Y. Kobayashi, S. Bai, Y. Higuchi, N. Ozawa, K. Adachi, and M. Kubo, Tribo-Chemical Reaction of Molybdenum Dithiocarbamate on Diamond-Like Carbon Films: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation, J. Comput. Chem., Jpn., 査読有, 13, 2014, 177-178.
DOI: 10.2477/jccj.2014-0034
- ⑫ S. Bai, H. Murabayashi, Y. Kobayashi, Y. Higuchi, N. Ozawa, K. Adachi, J. M. Martin, and M. Kubo, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Low Friction Mechanism of Fluorine-Terminated Diamond-Like Carbon Films, RSC Adv., 査読有, 4, 2014, 33739-33748.
DOI: 10.1039/C4RA04065A

[学会発表] (計 30 件)

- ① 久保百司、現場を見据えたマルチフィジックス計算科学シミュレーション技術～実際の適用例とその成果、今後の課題と可能性～、情報機構セミナー、大田区産業プラザ、東京、2017年3月17日(招待講演)
- ② 久保百司、マテリアルズインフォマティクスのための計算化学と材料設計、日本電子材料技術協会セミナー、早稲田大学、東京、2017年2月3日(招待講演)
- ③ 久保百司、村林宏紀、渡瀬恵子、大谷優介、西松毅、樋口祐次、尾澤伸樹、量子分子動力学法によるダイヤモンドライクカーボンと MoDTC のトライボ化学反応ダイナミクス、第 27 回内燃機関シンポジウム、東京工業大学、東京、2016年12月5-7日
- ④ M. Kubo, Quantum Chemical Molecular

Dynamics Simulations on Control of Tribochemical Reaction Dynamics for Design of Super-Low Friction System, EMN Phuket Meeting 2016 Energy Materials and Nanotechnology, Phuket, Thailand, November 3-7, 2016. (招待講演)

- ⑤ M. Kubo, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics of Diamond-Like Carbon Thin Films, 8th International Conference on Multiscale Materials Modeling, Dijon, France, October 9-14, 2016. (招待講演)
- ⑥ M. Kubo, M. I. De Barros Bouchet, and J. M. Martin, Superlubricity of ta-C with Oleic Acid Evidence for Graphene Oxide Formation, TFC ElyT Workshop 2016, Zao, Japan, October 6-8, 2016.
- ⑦ 久保百司、計算科学シミュレーションによるダイヤモンドライクカーボンの超低摩擦機能の設計、平成 28 年度第 3 回 DLC 技術研究会、宮城県自治会館、仙台、2016年9月30日(招待講演)
- ⑧ 久保百司、計算科学による超低摩擦材料設計のための摩擦プロセスシミュレーション、第 65 回高分子討論会、神奈川大学、横浜、2016年9月14日～16日(招待講演)
- ⑨ M. Kubo, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Synthesis and Etching Processes of Silicon Carbide, PRICM9, Kyoto, Japan, August 1-5, 2016.
- ⑩ 久保百司、摩擦と化学反応が複雑に絡み合ったトライボ化学反応の計算科学シミュレーション、2016年度第1回トライボケミストリー研究会、函館市民会館、函館、2016年7月12日(招待講演)
- ⑪ M. Kubo, S. Bai, M. Nakamura, Y. Higuchi, and N. Ozawa, Super-Low Friction Property of Si-Doped Diamond-Like Carbon by the Generation of Graphene Structure: Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, CIMTEC 2016, Perugia, Italy, June 5-9, 2016.
- ⑫ M. Kubo, Super-Low Friction Mechanism of Diamond-Like Carbon Thin Films: Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations, Global Nanotechnology Congress and EXPO, Dubai, United Arab Emirates, April 21-23, 2016. (招待講演)
- ⑬ 久保百司、マルチフィジックス計算科学シミュレーションとデータ科学、分子技術と理論計算・データ科学、大阪大学、大阪、2016年3月14日～15日(招待講演)
- ⑭ M. Kubo, Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribological and Mechanical Properties of

- Diamond-Like Carbon, BIT' s 2nd Annual World Congress of Smart Materials 2016, Singapore, Singapore, March 4-6, 2016. (招待講演)
- ⑮ 久保百司、スーパーコンピュータを活用した計算科学、第7回ナノテク・低炭素化材料技術シンポジウム、東北大学、仙台、2016年1月12日(招待講演)
- ⑯ 久保百司、計算科学シミュレーションの“現場”での活用ポイント・ノウハウ～各種ナノ材料設計、成膜、半導体・ナノ加工～、情報機構セミナー、大田区産業プラザ、東京、2015年11月20日(招待講演)
- ⑰ M. Kubo, Development of Multi-Physics Simulators Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method for Tribology, MEMS, and Energy Systems, The 10th Anniversary General Meeting of ACCMS-V0, Sendai, Japan, November 1-3, 2015. (招待講演)
- ⑱ 久保百司、摩擦と化学反応が複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象の計算科学シミュレーション、東北大学大学院薬学研究科セミナー、東北大学、仙台、2015年10月23日(招待講演)
- ⑲ M. Kubo, Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics and Its Influence on Mechanical Properties, International Workshop on Multiscale Computations on Mechanical Properties, Sendai, Japan, October 13-14, 2015. (基調講演)
- ⑳ M. Kubo, Development of Multi-Physics and Multi-Scale Simulators on MEMS, Semiconductor, and Tribology Processes, Xi' an Jiaotong University MEMS Seminar, Xi' an, China, September 25, 2015. (招待講演)
- ㉑ 久保百司、化学反応を考慮したマルチフィジックスシミュレータの開発とマルチスケールへの展開、第2回計算科学を活用した機能性材料開発ワークショップ、新エネルギー・産業技術総合開発機構本部、川崎、2015年6月4日(招待講演)
- ㉒ 久保百司、量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発とシステム・材料設計への応用、日本コンピュータ化学会2015春季年会、東京工業大学、東京、2015年5月28日～29日(招待講演)
- ㉓ 久保百司、量子分子動力学法によるトライボロジーシミュレーション、トライボロジー会議2015春、姫路商工会議所、姫路、2015年5月27日～30日(招待講演)
- ㉔ M. Kubo, Multi-Physics Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for the Design and Control of Chemical Reaction Dynamics, Theoretical Chemistry Colloquium, Taipei, Taiwan, May 1, 2015. (招待講演)
- ㉕ M. Kubo, Development of Multi-Physics Simulator Based on First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method, 2015 Symposium on Material Science and Energy Perspectives, Taipei, Taiwan, April 30-May 1, 2015. (招待講演)
- ㉖ M. Kubo, Multi-Physics Simulations on Growth and Tribology Processes of Diamond-Like Carbon Thin Films, ISPLASMA 2015, Nagoya, Japan, March 26-31, 2015. (招待講演)
- ㉗ 久保百司、トライボ化学反応ダイナミクス of マルチフィジックスシミュレーション、トライボロジー懇談会、東北大学、仙台、2015年1月26日(招待講演)
- ㉘ 久保百司、計算科学シミュレーション技術の基礎と各応用事例～現場で“使える”計算科学～、情報機構セミナー、江東区産業会館、東京、2014年11月21日(招待講演)
- ㉙ 久保百司、トライボロジーシミュレーション、グリーントライボ・ネットワーク夏の学校2014、東北大学、仙台、2014年7月14日～15日(招待講演)
- ㉚ M. Kubo, Tribochemical Reaction Dynamics by First-Principles and Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Methods, 13th International Ceramics Congress & 6th Forum on New Materials, Montecatini Terme, Italy, June 8-20, 2014. (招待講演)

〔図書〕(計1件)

- ① 伊藤寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司、エヌ・ティー・エス、表面・界面技術ハンドブック、2016、344-353.

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.simulation.imr.tohoku.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

久保 百司 (KUBO, Momoji)
東北大学・金属材料研究所・教授
研究者番号：90241538

(2) 研究分担者

足立 幸志 (ADACHI, Koshi)
東北大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：10222621

(3) 研究分担者

樋口 祐次 (HIGUCHI, Yuji)
東北大学・金属材料研究所・助教
研究者番号：30613260