

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01235

研究課題名（和文）1億原子系トライボ化学反応シミュレータの開発と超低摩耗実現のための理論基盤の構築

研究課題名（英文）Development of a 100-Million-Atoms Tribochemical Reaction Simulator and Establishment of a Theoretical Basis for Realizing Ultra-low Wear

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） 13,300,000円

研究成果の概要（和文）：省エネルギー対策に対する強い要請から、自動車を始めとする機械産業において、超低摩擦・超低摩耗技術の実現が急務となっている。そこで本研究では、開発済みの化学反応を解明可能な反応力場分子動力学シミュレータと化学反応を扱えないが数百万原子系を計算可能な並列化分子動力学シミュレータを融合し、これにOpenMPとMPIのハイブリッド並列化の実装などを行うことで、1億原子系でトライボ化学反応を解明可能なシミュレータを開発した。さらに開発シミュレータをSiCの水潤滑プロセスなどに応用し、粒界滑りや粒界がトライボ化学反応に与える影響など、大規模計算によって初めて解明可能な摩耗現象を明らかにすることに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

代表者は世界に先駆けて、量子論に基づきトライボ化学反応を解明可能なシミュレータを開発してきたが、量子論では大規模計算が不可能なため摩擦現象は解明できても、摩耗現象を解明できない問題点が顕在化してきた。そこで本研究では、量子論に基づかなくても化学反応を解明可能な反応力場分子動力学法を発展させることで、1億原子系でトライボ化学反応が誘起する摩耗現象を解明可能なトライボ化学反応シミュレータを開発した。これにより、「化学反応と機械的摩擦」が複雑に絡み合った摩耗現象のシミュレーションを世界に先駆けて実現するとともに、摩耗現象のトライボロジーシミュレーションという新たな研究分野を開拓することに成功した。

研究成果の概要（英文）：Due to the strong demand for energy conservation, there is an urgent need to realize ultra-low friction and ultra-low wear technology in the machinery industry, including automobiles. In this study, a simulator which can elucidate chemical reactions in 100-million-atoms system was developed (1) by integrating an already-developed reactive force field molecular dynamics simulator that can handle chemical reactions and an already-developed parallelized molecular dynamics simulator for several million-atom systems that cannot handle chemical reactions and (2) by implementing a hybrid parallelization of OpenMP and MPI. Furthermore, by applying the developed simulator to the SiC water lubrication process etc., we succeeded in clarifying wear phenomena, such as the effects of grain slippage and grain boundaries on the tribochemical reactions, which could be clarified only by large-scale calculations.

研究分野：計算科学

キーワード：トライボ化学反応 分子動力学シミュレータ 超低摩耗 超低摩擦 反応力場

## 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・超低摩耗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・超低摩耗技術は自動車分野のみならず、あらゆる機械産業分野、社会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。これに対し、代表者は独自に考案した量子分子動力学法に基づき、世界に先駆けて「摩擦と化学反応」が複雑に絡み合ったトライボ化学反応を量子論的に解明可能なトライボ化学反応シミュレータを開発した。さらに上記の開発シミュレータを活用することで、「超低摩擦」を実現するためのトライボ化学反応の制御手法の提案を実現してきた。しかし、企業の実験研究者からは、「実用化」には「超低摩擦」の実現だけでは不十分であり、「超低摩耗」の実現が不可欠であるとの意見を頂いた。

そこで本研究では、従来は全く不可能であった「化学反応と機械的摩擦」が複雑に絡み合った「摩耗現象」の解明を可能とする分子動力学シミュレータを、量子分子動力学法とは全く異なる理論に基づくことで開発し、超低摩耗を実現するためのトライボ化学反応の制御基盤と学理を構築する。

## 2. 研究の目的

代表者は、世界に先駆けて量子論に基づきトライボ化学反応を解明可能なシミュレータを開発し、「超低摩擦」を導くトライボ化学反応の解明を実現してきた。しかし、量子論では千原子系の計算が限界であり、「摩耗現象」を解明できない問題点が顕在化してきた。この「摩耗現象」の解明には1億原子系の大規模計算が必須であるため、量子論に基づくシミュレータとは、根本的に異なる理論に基づく全く新規なシミュレータの開発が必須である。しかし、従来は「化学反応」の解明には量子論の活用が必須であると考えられてきたため、1億原子系の計算が必須な「摩耗現象」における「トライボ化学反応」の理論的な解明は不可能であるとされてきた。そこで本研究では、この問題に対し、1億原子系でトライボ化学反応を解明可能な並列化反応力場分子動力学シミュレータを開発することで、世界に先駆けて、「化学反応と機械的摩擦」が複雑に絡み合った「摩耗現象」の解明を可能とすることを目的とする。さらに、「超低摩耗を生み出す潤滑膜の形成過程」の解明をも可能とすることで、実験研究者と共同で「超低摩耗」を実現するためのトライボ化学反応の制御基盤と学理を構築することも目的とした。

## 3. 研究の方法

代表者は、トライボロジーとは全く関係の無い応力腐食割れの分野において、量子論に基づかなくても化学反応を解明可能な反応力場分子動力学シミュレータを開発済みである。これは力場ポテンシャルを結合距離や結合角度の関数ではなく、結合次数の関数とすることで、量子論に基づかなくても化学反応の解明を可能としたものである。さらに代表者は、同じくトライボロジーとは全く関係の無い燃料電池の分野において、化学反応は扱えないが数百万原子系の大規模計算が可能な並列化分子動力学シミュレータも開発済みである。そこで本研究では、全く異なる研究分野用に開発した上記のととのシミュレータを融合し、トライボロジー分野に対応したアルゴリズムの導入、さらには、OpenMP と MPI のハイブリッド並列計算アルゴリズムの導入を実施することで、1億原子系でトライボ化学反応を解明可能な並列化反応力場分子動力学シミュレータの開発を実現する。

## 4. 研究成果

開発済みの化学反応を解明可能な反応力場分子動力学シミュレータと化学反応を扱えないが数百万原子系を計算可能な並列化分子動力学シミュレータを融合し、さらに上部基板への荷重の負荷、上部基板の一定速度での摩擦方向への移動機能の付与、さらには摩擦界面以外の部分での温度制御機能の付与などトライボロジー分野に対応したアルゴリズムを導入することで、数百万原子系でトライボ化学反応を解明可能な並列化反応力場分子動力学シミュレータを開発

することに成功した。そこで開発したトライボ化学反応シミュレータを活用して、実際に百万原子以上の計算モデルを用いて油潤滑プロセスにおけるトライボ化学反応の検討を行った。具体的に、本研究の分担者である足立らは、アルミニウム合金にレーザーテクスチャリングを施すことにより、アルミニウム原子の移着を抑制できることを報告しているが、テクスチャリングによって移着が抑制されるメカニズムは明らかになっていない。また、足立らはレーザー照射時にアルミニウム基板は酸化されることを報告している。そこで、多結晶のアルミニウム基板の粒界が酸化した計算モデルを構築し、約105万原子系で鉄/酸化したアルミニウム基板の摩擦界面に対して反応分子動力学シミュレーションを実施し、摩擦過程において表面テクスチャリングがアルミニウム原子の移着に及ぼす影響について検討を行った。ここで、移着が起こる環境下では油切れが起こっていることから、計算モデルには油は含めないこととした。図1(a)に表面テクスチャリングが存在しないアルミニウム基板（粒界は酸化した基板）を用いた計算モデル（以下、平板モデルと呼ぶ）、図1(b)に表面テクスチャリングを有するアルミニウム基板（粒界は酸化した基板）を用いた計算モデル（以下、テクスチャモデルと呼ぶ）を示す。この図では、構造解析によりFCC構造、BCC構造、HCP構造と判定された部分を、それぞれ緑色、青色、赤色で示し、それ以外と判定された部分を灰色で示した。よって、粒界部分は灰色で示されている。Feボールを右方向に移動することで摩擦シミュレーションを実施し、図中のピンク色で囲まれた部分に対して、酸素原子に配位しているアルミニウム原子の割合の時間変化について検討を行った（図2）。その結果、平板モデルでは、酸素原子に配位しているアルミニウム原子の割合は、摩擦前は39.6%であるのに対し、625ピコ秒後では41.8%に変化し、摩擦によって酸素原子の拡散が進み、アルミニウムの酸化反応が進行することが明らかとなった。一方、テクスチャモデルでは、酸素原子に配位しているアルミニウム原子の割合は、摩擦前は47.1%であるのに対し、625ピコ秒後では52.5%に増加し、平板モデルに比較してテクスチャモデルの方が摩擦によって酸素の拡散が激しくなり、アルミニウムの酸化反応がより進むことが明らかとなった。さらに、同じく反応力場分子動力学シミュレーションにより、アルミニウムの酸化が進むほど、アルミニウムの鉄への移着が抑制されることを明らかにした。以上の結果より、表面テクスチャリングによってアルミニウムの酸化が促進されることで、アルミニウムの鉄への移着が防止されるという、アルミニウムの移着防止に有効なメカニズムの一つを提案することができた。また、計算科学技術の進歩の観点からは、従来の量子分子動力学法を活用した千原子系の計算では、上記のような表面テクスチャリングを含む大規模モデルのシミュレーションは不可能であるため、本研究で開発した百万原子系を計算可能なトライボ化学反応シミュレータの有効性を示すことができた。

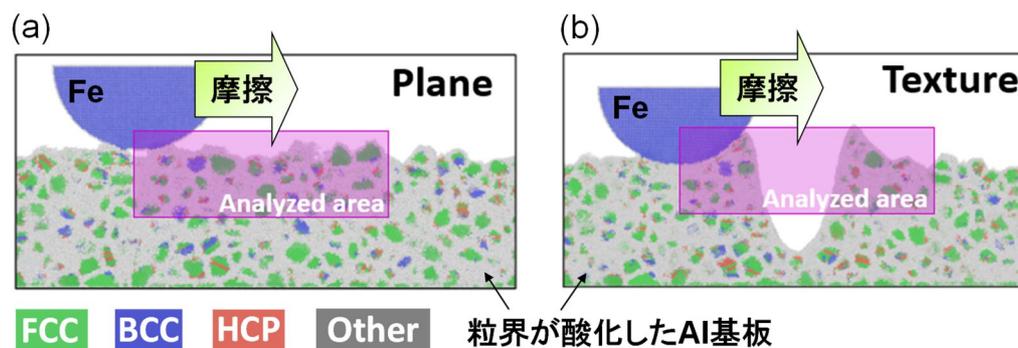


図1 粒界が酸化したアルミニウム基板の摩擦シミュレーションモデル(a)表面テクスチャリングを有しない場合（平板モデル）と(b)表面テクスチャリングを有する場合（テクスチャモデル）

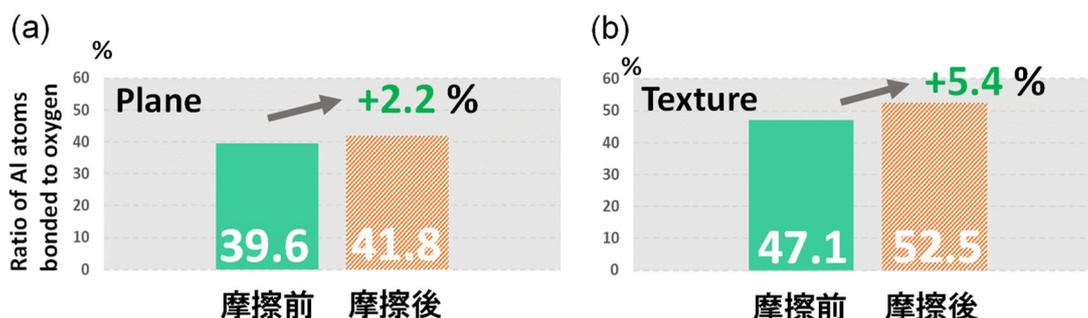


図2 (a)平板モデルと(b)テクスチャモデルの摩擦前と摩擦後（625ピコ秒後）の酸素原子に配位しているアルミニウム原子の割合

さらに、固体潤滑プロセスへの応用として、近年、潤滑剤として期待されている酸化グラフェンの低摩擦・低摩耗メカニズムについても検討を行った。具体的にはダイヤモンドライクカーボンの摩擦において、摩擦界面にグラフェンと酸化グラフェンを導入した場合について摩擦シミュレーションを実施した。図3(a)にダイヤモンドライクカーボンの摩擦界面にグラフェンを導入した場合、図3(b)にダイヤモンドライクカーボンの摩擦界面に酸化グラフェンを導入した場合の330ピコ秒後のスナップショットを示す。その結果、酸化されていないグラフェンは流動性が高く、摩擦界面から排出されやすいため、上下のダイヤモンドライクカーボンが凝着しやすいのに対して、酸化グラフェンは摩擦基板に固着することで炭素系の潤滑膜を形成し、基板同士の凝着を防ぐ効果があることを提言した。本成果により、超低摩耗を生み出すためのグラファイト潤滑膜の形成過程を明らかにすることができた。

次に、前述の数百万原子系でトライボ化学反応を解明可能な並列化反応分子動力学シミュレータに対して、OpenMPとMPIのハイブリッド並列化技術などを導入することにより、さらなる高速化を実現することで、1億原子系でトライボ化学反応を解明可能なトライボ化学反応シミュレータを開発することに成功した。さらに、上記で開発した1億原子系に対応したトライボ化学反応シミュレータを活用することで、SiCの水潤滑プロセスについて検討を行った。図4(a)に約1億原子から構成されるシミュレーションの初期モデルを、図4(b)に37.5ピコ秒後のシミュレーション結果を示す。図4(a)に示すように、約1億原子系のシミュレーションが実現できたことで、多数の粒界を含む現実的な計算モデルでのシミュレーションを可能とした。また、このシミュレーション結果として、図4(b)に示すように、摩擦に伴い粒界が大きく変形し、この粒界の変形が水潤滑に大きな影響を与えている様子を明らかにすることができた。さらに、図5(a)に摩擦過程における水分子の数の変化、図5(b)にSi-O結合数、C-O結合数の変化、図5(c)にSi-Si結合数、C-C結合数、Si-C結合数の変化を示す。図5(a)に示すように、摩擦に伴いトライボ化学反応が進行し水分子の数が減少している様子が見られる。また、図5(b)からトライボ化学反応によって、Siの酸化反応が進むのに対し、Cの酸化反応は起こりにくいことが示された。一方、図5(c)からSi-C結合数は摩擦に伴い減少していることから摩耗が進行していることが理解された。さらに、Si-Si結合数が著しく増加するのに対し、C-C結合数がわずかに増加していることがわかった。さらなる解析により、このSi-Si結合数の増加は、粒界部分で起こっていることが明らかになり、摩

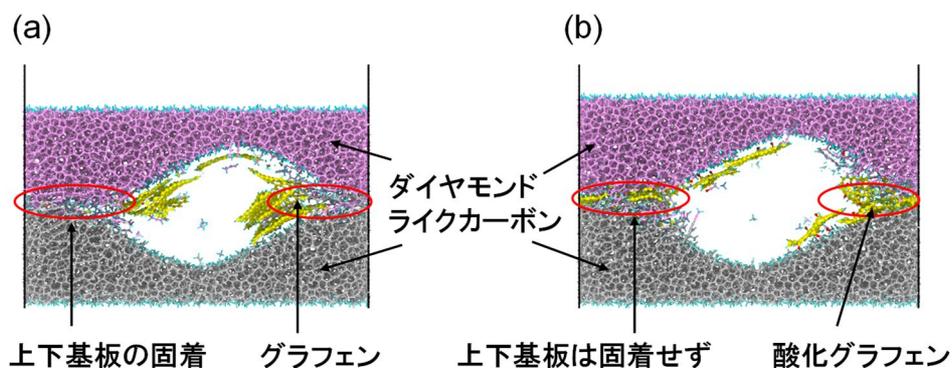


図3 ダイヤモンドライクカーボンの摩擦界面に(a)グラフェンを導入した場合と(b)酸化グラフェンを導入した場合の330ピコ秒後のスナップショット

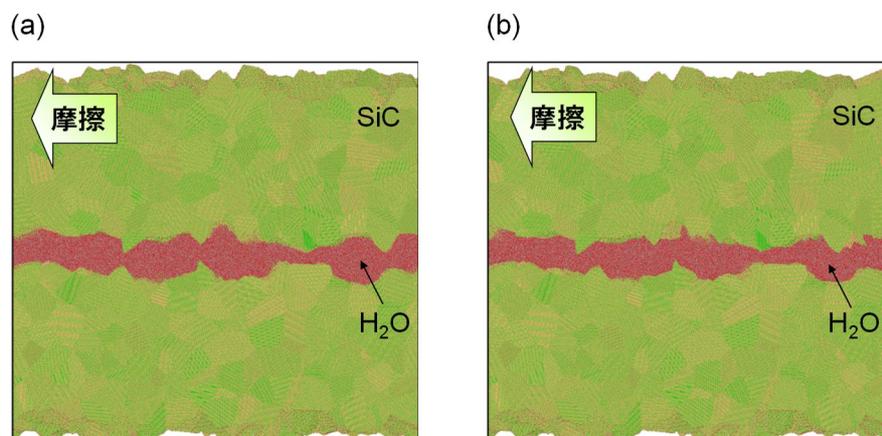


図4 1億原子系のSiCの水潤滑プロセスのスナップショット(a) 0ピコ秒と(b) 37.5ピコ秒

擦によって粒界滑りが起こっていることが明らかになった。さらに、表面の粒界部分が特に激しく摩耗していることなど大規模計算によってしか解明できない現象を明らかにすることができた。従来の量子分子動力学法を活用した千原子系の計算では、上記のような粒界滑りや粒界が摩耗に与える影響などを明らかにすることは不可能であることから、本研究で開発した1億原子系のトライボ化学反応シミュレータの有効性を明らかにすることができた。

さらに当初の予定にはなかったが、近年、第一原理分子動力学法に匹敵する高精度計算を実現しながら、第一原理分子動力学法では不可能な数万原子系の化学反応ダイナミクスを扱えるとして注目されているニューラルネットワークポテンシャル(NNP)に基づく分子動力学シミュレータをも開発した。具体的には、DeepPot-SEという方法論に基づくニューラルネットワーク分子動力学シミュレータをGPGPU上で動作するように開発を行った。また開発したNNPに基づく分子動力学シミュレータを活用し、シリコンナイトライドの水潤滑プロセスについて検討を行い、水とシリコンナイトライドがトライボ化学反応を起こすことで、アンモニアとコロイダルシリカを生成する摩耗現象を明らかにした。この結果は、研究分担者の足立らの実験結果と合致している。

実験研究では、固体潤滑プロセスへの応用として、ダイヤモンドライクカーボンとジルコニアの摩擦において、窒素ガスを用いたバブリングによるエタノールガス潤滑試験を行った。その結果、炭素系の潤滑膜が形成され、摩擦係数0.02程度の低摩擦が実現されることを明らかにした。次に、実験研究の水潤滑プロセスへの応用として、ダイヤモンドライクカーボンのプラズマ支援化学気相蒸着とSiCのスパッタリングによる物理気相蒸着の同時成膜により形成したSiC-DLC膜の低摩擦特性について検討を行った。その結果、ステンレス鋼SUS304を相手材として、上記の同時成膜技術によって作成したSiC-DLC膜の水潤滑プロセスにおいて、摩擦係数0.05以下の低摩擦を実現することができた。この時、SUS304表面にはSiとCによる親水性に富む潤滑膜が自己形成されることも明らかにした。さらに、実験研究の油潤滑への応用としては、高炭素クロム軸受鋼同士の冷凍機油中摩擦システムにおいて、添加剤としてナノダイヤモンドを導入することにより、摩耗の抑制が可能であることを実証した。特に一定値以上の鏡面化を施さない実機相当の粗さを有する初期表面を有する場合、30%以上の摩耗抑制が可能であることを明らかにした。さらに、ナノダイヤモンドの添加により、摩擦の安定性に改善がみられることを明らかにした。

以上の結果より、反応分子動力学法に基づき1億原子系のトライボ化学反応シミュレータの開発に成功するとともに、「摩耗現象」の解明を実現可能なシミュレーション技術を世界に先駆けて構築することで、超低摩耗実現のための理論基盤を構築することができたものとする。

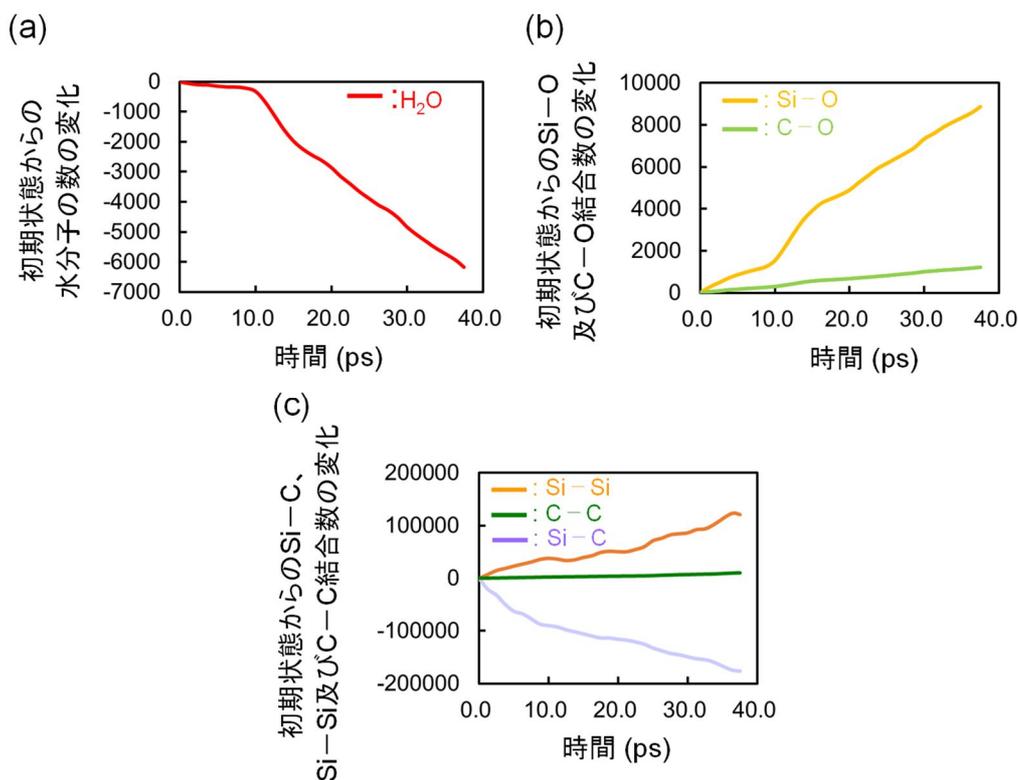


図5 1億原子系のSiCの水潤滑プロセスにおける(a)H<sub>2</sub>O分子数の変化、(b)Si-O、C-O結合数の変化、(c)Si-Si結合、C-C結合、Si-C結合数の変化

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 7件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 1件）

|   |                   |
|---|-------------------|
| 1. 著者名<br>Ryutaro Kudo, Yusuke Ootani, Shogo Fukushima, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo   | 4. 巻<br>-         |
| 2. 論文標題<br>Neural Network Molecular Dynamics Simulation on Friction-induced Chemical Reactions of Si3N4 in Water and Ethylene Glycol Environments | 5. 発行年<br>2024年   |
| 3. 雑誌名<br>Chemistry Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>印刷中 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有        |
| オープンアクセス<br>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<br>-         |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>Zhongmin Liu, Yusuke Ootani, Shuichi Uehara, Jing Zhang, Qian Chen, Yang Wang, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo        | 4. 巻<br>53            |
| 2. 論文標題<br>Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Cross-Linking on the Wear Mechanism of Polymer Brush | 5. 発行年<br>2024年       |
| 3. 雑誌名<br>Chemistry Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>upae035 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1093/chemle/upae035  | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                  |
|---|------------------|
| 1. 著者名<br>Yusuke Ootani, Masaki Tsuchiko, Masayuki Kawaura, Mizuho Yokoi, Qian Chen, Yuta Asano, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo                  | 4. 巻<br>72       |
| 2. 論文標題<br>Reactive Molecular Dynamics Simulation Study on Atomic-Scale Adhesive Wear Mechanisms of Single Crystalline Body-Centered Cubic Iron | 5. 発行年<br>2024年  |
| 3. 雑誌名<br>Tribology Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>35 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1007/s11249-024-01834-8  | 査読の有無<br>有       |
| オープンアクセス<br>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<br>-        |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Yang Wang, Haoyu Zhao, Chang Liu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo   | 4. 巻<br>13              |
| 2. 論文標題<br>Mechanisms of Chemical-Reaction-Induced Tensile Deformation of an Fe/Ni/Cr Alloy Revealed by Reactive Atomistic Simulations | 5. 発行年<br>2023年         |
| 3. 雑誌名<br>RSC Advances   | 6. 最初と最後の頁<br>6630-6636 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1039/D2RA07039A   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>該当する            |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Yang Wang, Jie Qin, Jingxiang Xu, Junhui Sun, Lei Chen, Linmao Qian, and Momoji Kubo     | 4. 巻<br>38                |
| 2. 論文標題<br>Definition of Atomic-Scale Contact: What Dominates the Atomic-Scale Friction Behaviors? | 5. 発行年<br>2022年           |
| 3. 雑誌名<br>Langmuir   | 6. 最初と最後の頁<br>11699-11706 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acs.langmuir.2c01786   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>該当する              |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Yun Long, Yang Wang, Volker Weihnacht, Stefan Makowski, Momoji Kubo, Jean Michel Martin, and Maria-Isabel De Barros Buchet | 4. 巻<br>10              |
| 2. 論文標題<br>Mechanism of Superlubricity of a DLC/Si3N4 Contact in the Presence of Castor Oil and Other Green Lubricants               | 5. 発行年<br>2022年         |
| 3. 雑誌名<br>Friction   | 6. 最初と最後の頁<br>1693-1706 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1007/s40544-022-0601-1  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>該当する            |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Fumiya Nakamura, Masayuki Kawaura, Shuichi Uehara, Koki Kanda, Yang Wang, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, and Momoji Kubo | 4. 巻<br>126             |
| 2. 論文標題<br>Three Tribolayers Self-Generated from SiC Individually Work for Reducing Friction in Different Contact Pressures                                  | 5. 発行年<br>2022年         |
| 3. 雑誌名<br>The Journal of Physical Chemistry C  | 6. 最初と最後の頁<br>2728-2736 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acs.jpcc.1c07668   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>該当する            |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>大谷 優介、足立 幸志、久保 百司                                | 4. 巻<br>66            |
| 2. 論文標題<br>分子動力学シミュレーションと摩擦実験のインタープレイ                      | 5. 発行年<br>2021年       |
| 3. 雑誌名<br>トライボロジスト   | 6. 最初と最後の頁<br>288-293 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.18914/tribologist.66.04_288 | 査読の有無<br>無            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>大谷 優介、王 楊、足立 幸志、久保 百司                       | 4. 巻<br>3           |
| 2. 論文標題<br>摩擦界面において力学的に誘起される化学反応がもたらす摩擦の分子動力学シミュレーション | 5. 発行年<br>2021年     |
| 3. 雑誌名<br>フロンティア                                      | 6. 最初と最後の頁<br>74-80 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし                        | 査読の有無<br>無          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>川浦 正之、大谷 優介、久保 百司                                   | 4. 巻<br>56            |
| 2. 論文標題<br>水環境における炭化ケイ素の摩擦・摩耗シミュレーションー水潤滑を利用した低摩擦システムの実用化に向けて | 5. 発行年<br>2021年       |
| 3. 雑誌名<br>セラミックス  | 6. 最初と最後の頁<br>690-693 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし                                | 査読の有無<br>無            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

[学会発表] 計22件 (うち招待講演 22件 / うち国際学会 11件)

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Atomistic Tribology Simulation - Present and Future Direction                 |
| 3. 学会等名<br>Mini-Symposium on Simulations of Interfaces and Ionic Materials (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo  |
| 2. 発表標題<br>Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Concerted Processes of Chemical Reactions at Nano-Scale and Mechanics at Meso-Scale in Friction Interfaces |
| 3. 学会等名<br>Joint USA-European Symposium on "Extreme-Scale Simulations, Machine Learning, and Neutron & X-Ray Scattering for Quantum Materials" (招待講演) (国際学会)        |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo  |
| 2. 発表標題<br>Super-Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Chemical Reaction Dynamics and Nano-Mechanics by Supercomputer<br>“MASAMUNE-IMR” |
| 3. 学会等名<br>Seminar of Multi-Scale and Multi-Physics Computational Simulation Approach in Various Fields of Engineering (招待講演) (国際学会)            |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo  |
| 2. 発表標題<br>Multi-Physics Simulations of Flow, Friction, and Reactions in Solid/Liquid Interface |
| 3. 学会等名<br>10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (招待講演) (国際学会)      |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Atomistic Tribology Simulation: Recent Advancement and Future Direction |
| 3. 学会等名<br>9th International Tribology Conference, Fukuoka 2023 (招待講演) (国際学会)      |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Recent Advancement of Tribology Simulation: Neural Network Potential Molecular Dynamics |
| 3. 学会等名<br>KTH-Tohoku University Workshop in Lulea (招待講演) (国際学会)                                   |
| 4. 発表年<br>2024年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>久保百司                                 |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータを活用した材料科学シミュレーション          |
| 3. 学会等名<br>工学院大学大学院工学研究科化学応用学専攻 化学応用学特論A (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年                                 |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保百司                                |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータを活用した力学と化学反応の協奏現象シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>計算科学と情報学を用いた材料開発の新展開-2023 (招待講演)    |
| 4. 発表年<br>2023年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保百司  |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータを活用した金属材料の腐食・摩耗現象の反応分子動力学シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>金属学会2023年秋期講演大会 (招待講演)                      |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo  |
| 2. 発表標題<br>Large-Scale Molecular Dynamics Simulations by Supercomputer Gives Paradigm Shifts on Theoretical Research on Tribology |
| 3. 学会等名<br>2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment (招待講演) (国際学会)    |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo  |
| 2. 発表標題<br>Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Chemical and Mechanical Wear Processes of Solid Lubricants |
| 3. 学会等名<br>10th International Conference on Multiscale Materials Modeling (招待講演) (国際学会)                             |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>久保百司                       |
| 2. 発表標題<br>トライボ協奏反応の分子動力学シミュレーション     |
| 3. 学会等名<br>第53回トライボロジーフォーラム研究会 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年                       |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保百司                                    |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータを活用した超大規模計算が実現する材料設計のパラダイムシフト |
| 3. 学会等名<br>日本無機薬品協会第36回技術講演会 (招待講演)                |
| 4. 発表年<br>2022年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保百司  |
| 2. 発表標題<br>自動車用材料の理論設計のためのスーパーコンピュータを活用した超大規模反応分子動力学シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>材料MBRコンソーシアム勉強会 (招待講演)                            |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>久保百司   |
| 2. 発表標題<br>マテリアルズインフォマティクスの基盤となる計算材料科学シミュレーションへの取組              |
| 3. 学会等名<br>表面・界面技術セミナー「グリーンイノベーションシンポジウム” かけ算の技術と地域活性化 ”」（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>久保百司   |
| 2. 発表標題<br>CVDプロセスと摩耗プロセスの全原子分子動力学シミュレーション                  |
| 3. 学会等名<br>化学工学会反応工学部会CVD反応分科会第37回シンポジウム「CVDと薄膜の計算科学」（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulations on Wear, Corrosion, and Cracking Mechanisms |
| 3. 学会等名<br>24th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering（招待講演）（国際学会）    |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>久保 百司  |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータ"MASAMUNE-IMR"を活用した大規模計算科学シミュレーション |
| 3. 学会等名<br>第91回金属材料研究所夏期講習会（招待講演）                       |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Supercomputer “MASAMUNE-IMR” Gives Paradigm Shifts on Atomistic Wear, Corrosion, and Cracking Simulations   |
| 3. 学会等名<br>The 5th Symposium for The Core Research Cluster for Materials Science and Spintronics, and the 4th Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保 百司                         |
| 2. 発表標題<br>超大規模計算によるパラダイムシフト             |
| 3. 学会等名<br>BIOVIA User Conference (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2021年                          |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>久保 百司                                   |
| 2. 発表標題<br>スーパーコンピュータを活用した超大規模並列計算による材料設計のパラダイムシフト |
| 3. 学会等名<br>CURIEセミナー (招待講演)                        |
| 4. 発表年<br>2021年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Momoji Kubo   |
| 2. 発表標題<br>Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Chemical-Reaction-Induced Wear Processes of Diamond-like Carbon Films |
| 3. 学会等名<br>2nd International Conference on Materials Genome (招待講演) (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2022年  |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

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

6. 研究組織

|       | 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号)                     | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号)                | 備考 |
|-------|---|--------------------------------------|----|
| 研究分担者 | 足立 幸志<br><br>(Adachi Koshi)<br><br>(10222621) | 東北大学・工学研究科・教授<br><br><br><br>(11301) |    |

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 |
|---------|---------|
|---------|---------|