

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 5 月 17 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18H01188

研究課題名(和文)分子論的に予言するガラス転移の劇的スローダウン：遷移状態と輸送特性

研究課題名(英文)Molecular mechanism of slow dynamics in glass-forming liquids: Transition states and transport phenomena

研究代表者

金 鋼 (Kim, Kang)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：20442527

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 10,400,000円

研究成果の概要(和文)：ガラスの劇的スローダウンとは、ガラス形成物質の緩和時間が有限温度で発散的傾向を示すことを意味する。その温度依存性にはおおまかに2種類ありフラジリティという指標によって分類されてきた。フラジリティを理解することはガラス形成物質を分類する上で本質的であり、そこで水・高分子・シリカ・金属ガラスを対象にした分子動力学シミュレーションによる理論解析を展開し、個別各論的な研究を乗り越える俯瞰的な研究をおこなった。特に、物質輸送の凍結度よりも粘性が見かけ上増大するStokes-Einstein則の破綻やデバイ則より過剰に励起されるボゾンピークという、ガラス形成物質の普遍的な異常性を包括的に解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

通常液体を冷却すると結晶固体となる。しかし、急冷や不純物の混合などの条件によって結晶化が阻害されることがある。このとき液体は過冷却状態となり、さらに冷却することでガラス状態へと転移する高分子ガラス、分子性ガラス、金属ガラスなどの材料の発展の一方で、ガラス転移に関する基礎的理解には数多くの課題が未だ多数残されている。本研究課題では分子動力学シミュレーションにより、様々なガラス形成物質で普遍的に見られるStokes-Einstein則の破綻やボゾンピークといった異常性に対して、俯瞰しうる知見統合を通じた問題解決をおこなった。

研究成果の概要(英文)：Drastic slowing-down of glass transition indicates that the relaxation time of glass-forming liquids shows a divergent tendency at finite temperatures. There are two types of temperature dependence, which have been classified according to the fragility concept. Understanding the mechanism of the fragility is essential for clarifying glass-forming liquids, and we have used molecular dynamics simulations for water, polymer, silica, and metallic glasses. In particular, and have conducted a bird's eye view study that overcomes individual studies. In particular, we comprehensively analyzed the anomalies of glass-forming liquids, such as the breakdown of the Stokes-Einstein relationship and the boson peak.

研究分野：ソフトマター化学工学

キーワード：ガラス転移 過冷却水 高分子ガラス フラジリティ ボゾンピーク ケージジャンプモデル ストックス-アインシュタイン則 分子動力学シミュレーション

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

ガラス形成物質は融点以下の過冷却状態で粘性が急激に増大する。ガラス転移温度と呼ばれる温度で最終的に発散し、その後あたかも固体のように振る舞う。シリカガラスをはじめとして、金属・ポリマー・コロイド・分子性液体など多様な材料がガラス状態をとり工業的用途も多い。したがってガラス形成の基本原理を解明することは、基礎科学としても材料設計の問題としても重要課題である。しかしながら、なぜ物質種によらず、液体的な乱れた構造を保持したまま緩和が劇的に遅くなるのかについてその原理は依然未解明のままである。既存の理論は実験あるいはシミュレーションのデータに基づいた検証が可能な形式となっておらず、この克服が喫緊の課題である。

## 2. 研究の目的

ガラス転移点近傍における粘性率の発散的振る舞いは物質により多様であるが、フラジリティという指標によって、大きく2種類に分類することができる。ひとつは常にアレニウス則にしたがう物質(これを **strong** 液体という)で、例えば4面体ネットワークが異方的に広がったシリカガラス( $\text{SiO}_2$ )などである。もうひとつは、金属ガラスや **o-terphenyl** など分子間相互作用が比較的等方的な液体であり、ガラス転移点近傍で超アレニウス則を示す(これを **fragile** 液体という)。さらに温度低下に伴って **fragile** から **strong** へ遷移する異常性を示す過冷却水などの物質もある。超アレニウス性を示す **fragile** 液体は常にアレニウスの **strong** 液体に比べて、低温になればなるほど高い活性化エネルギーを必要とする。これはスローダウンを支配する分子運動の協調性が物質ごとに異なることを示唆する。つまりフラジリティとは協調性を表現する量であると考えられる。この協調性に関連した現象として、物質輸送の凍結度よりも粘性が見かけ上増大する **Stokes-Einstein (SE)** 則の破綻・非調和的に低周波振動が促進されるボゾンピークなど、ガラス形成物質の普遍的な異常性などの未解決問題が挙げられる。これらを解明することはフラジリティ起源の同定そのものである。したがって「ガラス転移で出現する分子の協調性を支配するのは何か?」「活性化エネルギーを適切に与え、協調性を記述しうる反応座標・反応経路とは何か?」が本研究の核心をなす問いであり、本研究では分子動力学(MD)シミュレーションによる理論的研究を展開することにより課題解決を目指した。

## 3. 研究の方法

本研究課題では具体的に以下の研究項目をおこなった。

### (1) 反応速度論に基づく過冷却水における水素結合破断プロセスの解明

過冷却水における水素結合の破断プロセスの詳細を遷移状態理論の立場から解析した。水の剛体回転子モデルである **TIP4P** を用いた過冷却水に対して、**MD** シミュレーションをおこなった。 $1 \text{ g/cm}^3$  の定積条件下で、温度を **300 K** から **190 K** まで徐々に冷却させ、いくつかの熱力学状態を作成した。それぞれの状態で **100 ns** のトラジェクトリを生成し、水素結合ダイナミクスを解析した。水素結合切断過程を評価するために、2つの水分子間の距離と角度の組み合わせを反応座標とした2次元平均力ポテンシャル(PMF)を求め、水素結合領域と水素結合寿命時間の温度依存性について解析した。特に、水素結合の形成と破断プロセスを自己相関関数とその時間微分である反応流速から定量化した。これにより、水素結合時間スケールの温度依存性を特徴付けた。

### (2) 過冷却水における拡散運動モデリングの構築

過冷却水における、水素結合の局所的な運動性と系全体の輸送特性の関係について明らかにすることが、本研究の目的である。水の剛体回転子モデルである **TIP4P/2005** を用いた過冷却水に対して、**MD** シミュレーションをおこなった。 $1 \text{ g/cm}^3$  の定積条件下で、温度を **300 K** から **190 K** まで徐々に冷却させ、いくつかの熱力学状態を作成した。それぞれの状態で **100 ns** のトラジェクトリを生成し、再隣接の水素結合ネットワークダイナミクスを定量化した。特に、過冷却状態におけるケージ効果に着目し、水素結合ネットワークダイナミクスから水分子のダイナミクスを2状態に分類した連続時間ランダムウォークモデルを構築した。

### (3) 過冷却水における水素結合ダイナミクスとマルコフ状態モデル解析

水分子間の水素結合破断は、水分子3体間の協調的運動によって引き起こされることが明らかにされている。**300 K** の純水中では水素結合アクセプター分子が持つ欠陥構造(水素結合 **3・5** 本)が伝搬する形で水素結合が切り替わる。この切り替え運動に伴い、ドナー分子は大きく回転運動を行う。そのため水分子2体間の距離と角度を変数として描かれる自由エネルギー曲面上

には、角度を増加させる方向に水素結合-非結合状態を分離する遷移状態となる鞍点が存在する。しかし、温度の低下とともに、自由エネルギー曲面上で鞍点が存在しない並進方向への破断プロセスが顕著になることを、我々の先行研究によって明らかにした。回転運動を伴う水素結合破断とは異なり、並進運動を伴う水素結合破断は周囲の構造変化・協同的運動については十分な知見は得られていない。そこで本研究では、マルコフ状態モデルを利用して水素結合アクセプタースイッチングについて解析をおこなった。これまでもマルコフ状態モデル解析は水素結合ダイナミクスに適用された研究例があるが、本研究は温度依存性の詳細を解析する。特に水素結合アクセプター切り替え運動を引き起こすアクセプター分子の水素結合数に注目した。過冷却状態では四面体構造が顕著となり、水素結合組み換えの起点となる欠陥構造の数が急激に減少する。そこでアクセプター分子の持つ水素結合数に着目して微視的状态を分割し、遷移経路解析を実行することで温度低下に伴い増加する経路を抽出した。

#### (4) 過冷却水のケージ・ジャンプモデルでモデル化される拡散係数と構造緩和時間

過冷却状態においてある温度から、拡散係数と構造緩和時間の逆数が異なる温度依存性を示す性質は、Stokes-Einstein 則の破綻として多く注目が集まっている。特に分子構造や局所的な分子の運動性が重要であると考えられるが、その関係をモデル化する手法は得られていない。一方で過冷却液体において分子の運動性低減はケージ効果と呼ばれる現象論的モデルで一般に説明される。ケージ効果とは、過冷却液体の分子が周囲の分子によって形成されるケージに一時的に囚われ、長時間の拘束された後、ケージが崩壊して囲まれた分子がジャンプするという描像である。我々はこれまでの研究で、連続時間型ランダムウォークモデルを基盤に、分子の短時間のダイナミクスを運動が低減したケージ状態と拡散的運動を行うジャンプ状態に分割するケージ・ジャンプモデルを利用し、過冷却水中での拡散係数を局所的な水素結合ネットワークのダイナミクスから予測するモデル式・アルゴリズムの開発を行ってきた。本研究ではさらに、拡散係数と構造緩和時間のデカップリングについて、ケージ・ジャンプモデルを用いて局所的ダイナミクスから原因を調べた。

#### (5) 高分子ガラスの状態密度解析とボゾンピーク

アモルファス固体は、過剰な低振動数励起である、いわゆる振動状態密度のデバイ則から乖離したボゾンピークなどの特異な振動的特性を示す。ボゾンピークが実験的に観測されている高分子ガラスを対象として、粗視化 MD シミュレーションを用いた振動状態密度解析をおこなった。特に、鎖の 1 本の剛性を系統的に変化させ、高分子のガラス転移温度・弾性特性の剛性依存性を明らかにし、振動状態密度に潜むスケールリング性を見出すことによりボゾンピークの起源を明らかにすることを目的とした。粗視化高分子モデルとして代表的な Kremer-Grest モデルを用いた。

#### (6) 高分子ガラスのボゾンピークと弾性不均一性による理解

研究項目(5)で見出した高分子ガラにおけるボゾンピークのせん断弾性率によるスケールリング性を理解するために、弾性不均一理論による理解を試みた。高分子ガラスの場合、ボゾンピークは構成する高分子鎖の曲げ剛性に影響されると考えられている。我々の先行研究で、ボゾンピークと弾性特性の普遍性を明らかにしました。この結果は、弾性不均一理論によれば、局所的なせん断弾性率の空間的不均一性が曲げ剛性の変化に対して鈍感であることを示している。そこで、局所的なせん断弾性率分布を直接測定した。さらに横方向の音波の伝搬についても調べ、音速と減衰率のデバイ周波数によるスケールリング性について検討した。

#### (7) ガラスの振動状態密度とフラジリティの相関解明

本研究ではフラジリティを決定づける分子論的な支配因子を明らかにすることを目標としている。特に、2 成分 Lennard-Jones ポテンシャルを用いてアモルファスシリカに対して提案された Coslovich-Pastore(CP)モデルを拡張した一般化 CP モデルを採用した。このモデルでは、異成分間にはたらく引力の大きさをパラメータ  $C$  によって調整することで、フラジリティが制御できることが知られている。フラジリティの支配因子を明らかにするために以下の解析をおこなった。第 1 に shoving モデルとの比較をおこなった。shoving モデルとは、構造緩和時間 $\tau_\alpha$ を調和振動子どうしのポテンシャル障壁交差で与えるものである。特に、ポテンシャルエネルギーがせん断弾性率  $G_p$  によって与えられるとし、 $A$  を定数として $\tau_\alpha \propto \exp(AG_p/k_B T)$ とあわらすモデルである。言い換えれば、shoving モデルに従えばフラジリティはせん断弾性率  $G_p$  によって決定されることを示唆する。第 2 に、shoving モデルの前提となるガラスの固体としての性質を特徴づけるために振動状態密度解析をおこなった。ガラスにおいてはその非晶性から振動状態密度にデバイ則よりも過剰な振動モードであるボゾンピークが現れることが知られている。エネルギー等分配則より隣接粒子によって作られるケージ内での熱振動振幅の二乗平均であるデバイ・ワラー因子  $\langle x^2 \rangle$  を振動状態密度から評価することができる。つまり、shoving モデルをボゾンピークのフラジリティ依存性から検証することができ、本研究でこれをおこなった。

#### 4. 研究成果

本研究課題で得られた成果は各研究項目において以下のとおりである。

##### (1) 反応速度論に基づく過冷却水における水素結合破断プロセスの解明

水 2 量体の分子間距離・角度を反応座標とし 2 次元 PMF から得られる自由エネルギー局面の鞍点で特徴付けられる遷移状態を特定した。また遷移状態における反応流速  $k_{TST}$  を計算し、水素結合平均寿命  $\tau_{HB}$  の逆数から得られる反応定数  $k$  との比から透過係数  $\kappa = k/k_{TST}$  を定量化した。その結果、過冷却度の増大により透過係数は顕著な温度依存性を示すことを見出し、このことが  $\tau_{HB}$  の温度依存性における非アレニウスの挙動の説明しうることを明らかにした。すなわち、深い過冷却状態では、2 次元 PMF 上の鞍点におけるエネルギー障壁と水素結合寿命時間との間に遷移状態理論では説明できない活性化エネルギー成分があることを確認した。さらに、遷移状態理論が破綻する温度領域では、常温とは異なり 2 次元 PMF 上の鞍点を通らない経路が出現することを明らかにした。これは深い過冷却状態では選択した 2 つの水分子における構造変化だけでは、水素結合破断の経路を適切に記述できないことを意味している。

##### (2) 過冷却水における拡散運動モデリングの構築

水分子の結合数を 3 以下 (P3)、5 以上 (P5) と 4 の 3 種類に割り当てた。さらに 4 本の分子には、結合している水分子の水素結合数が全て 4 (P4) とそれ以外 (P4\*) の 2 種類に分類した。常温では結合数 3 の水分子が多く存在するが、低温になるにしたがって結合数 4 の割合が増加し、さらに 200K 以下では 4 面体構造による秩序化がより顕著になることがわかる。得られた結合数から、結合数 4 (4 面体構造) の状態にある分子はケージ状態にある、それ以外でジャンプ状態であると分類した。特に、最隣接程度の局所的な水素結合ネットワークの経時変化に関する情報に基づいたことが本研究のオリジナルな点である。過冷却度とともにケージ状態継続時間が指数関数的に増加することが確認でき、水素結合寿命と対応していることがわかった。連続時間ランダムウォーク理論に基づき、2 状態間を遷移する拡散モデルを構築したところ、平均二乗変位の長時間挙動から得られる拡散係数と非常に良い一致が得られた。水素結合ネットワーク構造からランダムウォーク素過程を抽出したことになるが、しかしより過冷却度が深い温度 190 K では、拡散モデルから乖離することがわかり、このことは水分子のダイナミクスは水素結合ネットワーク構造の中距離的な構造が協調的運動に関与していることを意味する。

##### (3) 過冷却水における水素結合ダイナミクスとマルコフ状態モデル解析

水素結合領域 (HB) は、O-O 距離  $R < 0.35$  nm, O-OH 角度  $\beta < 30^\circ$  と定義できる。さらに水素結合が破断先と中間状態として弱い水素結合状態 (w) ( $R < 0.35$  nm,  $\beta \geq 30^\circ$ ) および、他の水素・酸素原子で水素結合している状態 (a)、それら以外の非結合状態 (nHB) の 4 つの状態を設定する。さらにアクセプター分子の水素結合本数が 3 本以下、4 本、5 本以上の 3 種類に分けることで、水分子 3 体間の構造を、この微視的状态に割り当てることで、144 個の状態間のマルコフ状態モデルを構築する。さらに遷移経路解析を行い、アクセプター切り替え運動において Ha が遷移経路となる選択率の温度依存性を求めた。温度低下に伴い、アクセプター分子が水素結合 4 本を持つ遷移経路の選択率は上昇し、それ以外の選択率は減少した。Ha は自由エネルギー曲面からは想定できない破断経路であり、深い過冷却状態では Ha を経由する破断には特に水素結合ネットワークに沿った協働的運動が重要であることを示唆する結果を得た。

##### (4) 過冷却水のケージ・ジャンプモデルでモデル化される拡散係数と構造緩和時間

各水分子の短時間のダイナミクスをケージ状態とジャンプ状態の 2 状態に分割する際に水素結合ネットワークの情報を参照する。各水分子の短時間のダイナミクスをケージ状態とジャンプ状態の 2 状態に分割し、2 状態の継続時間、各状態における粒子の移動距離、そしてケージ状態とジャンプ状態の存在比を求めた。さらに、連続時間型ランダムウォークモデルで与えられる 2 つの運動性低減を表す 2 つの時間スケールは、ケージ時間の始まりから終わりまでの平均時間を意味する継続時間  $\tau_c$  と、任意の点からケージ時間が終了するまでの持続時間  $\tau_p$  に対応する。そこでこの 2 つの温度依存性を求め、分布および平均値の温度依存性を求めた。拡散係数  $D$  と緩和時間  $\tau_\alpha$  の積およびケージ・ジャンプモデルで与えられる 2 つの緩和時間の比の温度依存性をみたところ、240 K を境に両者の関係がデカップリングすることが確認できる。さらにこのデカップリングはジャンプ状態の平均移動距離と相関を持っており、第一配位圏程度の局所的なダイナミクスにおける運動のデカップリングが、系全体の動的不均一性を引き起こすことを明らかにした。

#### (5) 高分子ガラスの状態密度解析

高分子鎖長を  $L$  として、 $L=3, 50$  についてガラス状態における振動状態密度解析をおこない、デバイ理論との比較をおこなった。その結果、高分子性のガラス状態で振動状態密度  $g(\omega)/\omega^2$  の周波数依存性からデバイ理論よりも過剰なピークつまりボゾンピークがみられた。また、このボゾンピークがデバイレベルによりスケールできることが明らかとなった。さらに、デバイレベルの要素である、体積弾性率・せん断弾性率についての解析から体積弾性率に比べてせん断弾性率が遥かに小さいため、ボゾンピークを支配するのは剪断弾性係数であるということを見出した。このことはボゾンピークとマクロなせん断弾性に相関があるということを示しており LJ ガラス系との結果と矛盾がない。つまり、本研究の結果は、最も単純なガラスモデルである LJ ガラス系で成り立つ理論が高分子ガラス系でも成り立つということを示唆するものである。

#### (6) 高分子ガラスのボゾンピークと弾性不均一性による理解

局所的なせん断弾性率分布の不均一性の程度は、高分子鎖の曲げ剛性の変化に影響されないことがわかった。弾性不均一理論によれば、弾性の空間不均一性が変化しない場合、非晶質物質の振動・音響特性は大域的な弾性率によってのみ制御される。本研究では、この理論的予測と一致するように、横方向の音波励起とボゾンピークがいずれもせん断弾性率によってのみ単純にスケールされることを実証した。この結果は、アモルファス固体の力学的・振動的特性を記述するための中心的な理論の一つである弾性不均一理論を検証する良い実証研究となっている。また、動的散乱因子から横方向の音速と減衰率を周波数の関数として求めたところ、デバイ周波数によるスケール性が成り立っていることを見出しており、せん断弾性率の不均一性によって説明された。

#### (7) ガラスの振動状態密度とフラジリティの相関解明

fragile 液体では shoving モデルを拡張した  $\tau_\alpha \propto \exp(AG_P/k_B T + B(G_P/k_B T)^2)$  にスケールされた。一方で、strong ガラスはスケールされないことがわかった。すなわち、せん断弾性率  $G_P$  だけではフラジリティは説明されない結果を得た。同様に  $\tau_\alpha$  はデバイ・ワラー因子  $\langle x^2 \rangle$  によってもスケールされなかった。さらに、ボゾンピーク周波数はフラジリティによって変化するが、せん断弾性率の音波伝播のみではスケールされていないことがわかった。このことは、shoving モデルがフラジリティによってスケールされない結果と矛盾がない。以上より、ガラス形成液体のダイナミクスと弾性率を結びつける shoving モデルを検証したところ、フラジリティを与える因子はせん断弾性率だけではないことがわかった。特に strong ガラスでは体積弾性率の寄与を含めたより複雑な振動励起を考慮する必要があることを示唆するものである。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 17件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 4件）

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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Goto Shota, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 155
2. 論文標題 Effects of chain length on Rouse modes and non-Gaussianity in linear and ring polymer melts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124901 ~ 124901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0061281	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 Pastore Raffaele, Kikutsuji Takuma, Rusciano Francesco, Matubayasi Nobuyuki, Kim Kang, Greco Francesco	4. 巻 155
2. 論文標題 Breakdown of the Stokes-Einstein relation in supercooled liquids: A cage-jump perspective	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114503 ~ 114503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0059622	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 Kikutsuji Takuma, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 154
2. 論文標題 Transition pathway of hydrogen bond switching in supercooled water analyzed by the Markov state model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 234501 ~ 234501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0055531	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 Tomoshige Naoya, Goto Shota, Mizuno Hideyuki, Mori Tatsuya, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 33
2. 論文標題 Understanding the scaling of boson peak through insensitivity of elastic heterogeneity to bending rigidity in polymer glasses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 274002 ~ 274002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/abfd51	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 Shiba Hayato	4. 巻 2207
2. 論文標題 Enhancing efficient computation of long-wavelength relaxation dynamics in a 2D liquid involving millions of particles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012026 ~ 012026
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2207/1/012026	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 芝隼人、下川辺隆史	4. 巻 2022-HPC-183
2. 論文標題 グラフニューラルネットワークによる長時間分子動力学予測と性能評価	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング	6. 最初と最後の頁 1 ~ 11
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 Mori Yusuke, Okazaki Kei-ichi, Mori Toshifumi, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 153
2. 論文標題 Learning reaction coordinates via cross-entropy minimization: Application to alanine dipeptide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054115 ~ 054115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0009066	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 Shiba Hayato, Kawasaki Takeshi, Kim Kang	4. 巻 123
2. 論文標題 Local Density Fluctuation Governs the Divergence of Viscosity Underlying Elastic and Hydrodynamic Anomalies in a 2D Glass-Forming Liquid	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 265501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.123.265501	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 Tomoshige Naoya, Mizuno Hideyuki, Mori Tatsuya, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 9
2. 論文標題 Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of the rigidity of chain bending	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-55564-2	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 Kikutsuji Takuma, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 294
2. 論文標題 Consistency of geometrical definitions of hydrogen bonds based on the two-dimensional potential of mean force with respect to the time correlation in liquid water over a wide range of temperatures	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Liquids	6. 最初と最後の頁 111603
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molliq.2019.111603	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 Kawasaki Takeshi, Kim Kang	4. 巻 2019
2. 論文標題 Classification of mobile- and immobile-molecule timescales for the Stokes-Einstein and Stokes-Einstein-Debye relations in supercooled water	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	6. 最初と最後の頁 84004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-5468/ab3114	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 Kawasaki Takeshi、Kim Kang	4. 巻 9
2. 論文標題 Spurious violation of the Stokes-Einstein-Debye relation in supercooled water	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 8118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-44517-4	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 Kikutsuji Takuma、Kim Kang、Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 150
2. 論文標題 Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5095978	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 Mizuta Keisuke、Ishii Yoshiki、Kim Kang、Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 15
2. 論文標題 Bridging the gap between molecular dynamics and hydrodynamics in nanoscale Brownian motions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 4380 ~ 4390
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sm00246d	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 Masutani Keiichi、Yamamori Yu、Kim Kang、Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 150
2. 論文標題 Free-energy analysis of the hydration and cosolvent effects on the $\beta$ -sheet aggregation through all-atom molecular dynamics simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 145101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5088395	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 Masutani Keiichi, Yamamori Yu, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 150
2. 論文標題 Free-energy analysis of the hydration and cosolvent effects on the $\beta$ -sheet aggregation through all-atom molecular dynamics simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 145101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5088395	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 Kikutsuji Takuma, Kim Kang, Matubayasi Nobuyuki	4. 巻 148
2. 論文標題 How do hydrogen bonds break in supercooled water?: Detecting pathways not going through saddle point of two-dimensional potential of mean force	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 244501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5033419	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75件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 環状高分子の拡散過程における非ガウス性と分子内運動モード特性
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 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子集合系における熱振動と構造緩和の関係性に対する分子シミュレーション解析
3. 学会等名 化学工学会関西大会2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子集合系における熱振動と構造緩和の関係性に対する分子シミュレーション解析
3. 学会等名 2021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
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, Francesco Rusiano, Raffaele Pastore, Francesco Greco, 松林伸幸
2. 発表標題 ケージ・ジャンプでモデル化される拡散係数と構造緩和時間
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 環状高分子の拡散過程における非ガウス性と分子内運動モード特性
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芝隼人
2. 発表標題 大規模シミュレーションによるガラス・ソフトマターの連続体特性の研究
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子集合系における熱振動と構造緩和の関係性に対する分子シミュレーション解析
3. 学会等名 化学工学会第52回秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芝隼人
2. 発表標題 2次元ガラス形成液体の長時間流体緩和
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 金鋼
2. 発表標題 高分子ガラスのボゾンピーク：せん断弾性によるスケーリング性の検証
3. 学会等名 東大物性研短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 水素結合ネットワークに基づくケージ・ジャンプモデルの開発とその過冷却水における拡散ダイナミクスへの応用
3. 学会等名 化学工学会第86年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, Francesco Rusiano, Raffaele Pastore, Francesco Greco, 松林 伸幸
2. 発表標題 ケージ・ジャンプでモデル化される拡散係数と構造緩和時間
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 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 環状高分子ガラスの振動状態密度解析
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 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体のフラジリティとボゾンピークによるスケーリング性の検討
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 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体のフラジリティとボゾンピークによるスケーリング性の検討
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 環状高分子メルトの振動状態およびダイナミクスの粗視化分子動力学シミュレーションによる解析
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 直鎖状高分子と環状高分子のガラス状態における振動状態密度解析
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 後藤頌太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた環状および直鎖高分子メルトにおけるラウスモード解析
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 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体のフラジリティとスケーリング関係の考察
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 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体の振動状態とそのフラジリティ依存性
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 金鋼, 水田圭亮, 石井良樹, 松林伸幸
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションは流体力学をどこまで記述できるのか? :流体力学半径の分子論的な描像
3. 学会等名 化学工学会第85回年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 芝隼人, 川崎猛史, 金鋼
2. 発表標題 2次元ガラス形成液体の粘弾性特性と緩和過程
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介, 岡崎圭一, 森俊文, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 複雑な分子系の自由エネルギーを特徴づける反応座標の探索: コミッターと最尤推定法の融合
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子ガラスのボゾンピーク: 粗視化分子動力学シミュレーションによる起源解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体の振動状態密度とそのフラジリティ依存性
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金鋼
2. 発表標題 ダイナミクスを適切に記述する自由エネルギーと反応座標の探索
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ガラス形成液体の振動状態密度とフラジリティ依存性
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介, 岡崎圭一, 森俊文, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 水中でのイオン解離のダイナミクスを特徴づける反応座標の探索: コミッターと最尤推定法の融合
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 水素結合ネットワークに基づくケージ・ジャンプモデルの開発とその過冷却水における拡散ダイナミクスへの応用
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子ガラスにおけるボゾンピークに潜んだ普遍性: デバイ理論と弾性力学に基づく振動状態密度のスケーリング
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kang Kim
2. 発表標題 Bridging the gap between molecular dynamics and hydrodynamics in nanoscale Brownian motions
3. 学会等名 5th International Conference on Molecular Simulation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Tomoshige, Hideyuki Mizuno, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of rigidity of chain bendings
3. 学会等名 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuma Kikutsuji, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement
3. 学会等名 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yusuke. Mori, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Exploring reaction coordinates for alanine dipeptide isomerization: Commitor and likelihood maximization
3. 学会等名 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子ガラスの振動状態密度解析
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介, 岡崎圭一, 森俊文, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの異性化を特徴づける反応座標: コミッターと最尤推定法による解決
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介, 岡崎圭一, 森俊文, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 溶媒中のイオン解離を特徴づける反応座標の探索
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 芝隼人, 川崎猛史, 金鋼
2. 発表標題 2次元ガラス形成液体の粘弾性特性とストークス・アインシュタイン関係
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 シリカガラスのモデル依存性の分子動力学解析
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金鋼, 水田圭亮, 石井良樹, 松林伸幸
2. 発表標題 コロイド分散系における分子動力学から流体力学への橋渡し: 溶媒和自由エネルギーとロングタイムテール
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kang Kim
2. 発表標題 Cage-jump model connecting hydrogen-bond rearrangements and molecular diffusion in supercooled water
3. 学会等名 International school: "Water and water systems" 2nd Course: "Polymers and Soft Materials: Glasses, Gels and Networks" (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hayato Shiba, Takeshi Kawasaki, Kang Kim
2. 発表標題 Identifying relaxation processes in glass-forming liquids in two dimensions
3. 学会等名 25th International Congress on Glasses (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuma Kikutsuji, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Diffusion dynamics of supercooled water modeled with the cage-jump motion and hydrogen-bond rearrangement
3. 学会等名 Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kang Kim, Takeshi Kawasaki
2. 発表標題 Classification of mobile- and immobile-molecule timescales for the Stokes-Einstein and Stokes-Einstein-Debye relations in supercooled water
3. 学会等名 Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大門翔太, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるシリカガラスの振動状態密度解析
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介, 岡崎圭一, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの異性化過程を記述する反応座標の探索: コミッターと最尤推定法の融合
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体の振動状態密度解析
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森勇介 岡崎圭一, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの構造変化を記述する反応座標とコミッター
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金鋼
2. 発表標題 遷移経路サンプリングとコミッター解析によるジペプチド構造変化を記述する反応座標の探索
3. 学会等名 研究会「凝縮系の理論化学」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 溶媒中ナノ粒子の流体力学挙動と溶媒和構造：物理化学と流体力学の融合による横断的解析
3. 学会等名 第8回ソフトマター研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体のガラス転移温度の解析
3. 学会等名 第8回ソフトマター研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森勇介, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 コミッター解析を用いたジペプチドの構造 異性化を記述する反応座標の選択に関する考察
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 友重直也, 水野英如, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体のガラス転移温度の解析
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 菊辻卓真, 川崎猛史, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 動的不均一性から探る過冷却水に内在する 協調的運動
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増谷佳一, 山守優, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる シー ト凝集の自由エネルギー解析
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 溶媒中ナノ粒子の流体力学挙動と溶媒和構造: 物理化学と流体力学の融合による横断的解析
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会, 産業技術総合研究所
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kang Kim, Takuma Kikutsuji, and Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Kinetic pathways of hydrogen bonds break in supercooled water
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 Takuma Kikutsuji, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Connecting hydrogen-bond network rearrangements and diffusional molecular motions in supercooled water
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Keiichi Masutani, Yu Yamamori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi
2. 発表標題 Free energy analysis of amyloid aggregation by molecular dynamics simulation
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 金鋼
2. 発表標題 ガラス転移の劇的スローダウン：分子シミュレーションによるシリカガラスと金属ガラスを俯瞰的に理解する試み
3. 学会等名 第79回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 遷移状態理論から解析する過冷却水中における水素結合破断：透過係数の温度依存性と活性化エネルギーの物理的実態
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 友重直也, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子粗視化モデルにおけるガラス転移点でのセグメント密度
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森勇介, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの構造変化を記述する反応座標の選択
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ナノ流体の流体力学半径に対する溶媒和構造による特徴付け
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 金鋼, 水田圭亮, 石井良樹, 松林伸幸
2. 発表標題 ナノ粒子が示す流体力学的挙動の全原子分子シミュレーションによる解析
3. 学会等名 日本流体力学会年会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kang Kim
2. 発表標題 On the violation of Stokes-Einstein relation in supercooled water: Role of hydrogen-bond lifetime
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所国際モレキュール型プログラム "Rheology of disordered particles - suspensions, glassy and granular materials" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeshi Kawasaki, Kang Kim
2. 発表標題 Identification of time-scales that support violation or preservation of Stokes-Einstein relation in supercooled water
3. 学会等名 Unifying Concepts in Glass Physics VII (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 自由エネルギー曲面の鞍点を通らない反応経路の検出: 水中における水素結合破断の非アレニウスの挙動
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増谷佳一, 山守優, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 MDシミュレーションを用いた シート凝集の自由エネルギー解析
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森勇介, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの構造変化における反応経路と反応座標
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 金鋼
2. 発表標題 過冷却水において水素結合はどのように切れるのか?: 自由エネルギー曲面の鞍点を通過しない遷移経路の検出
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 友重直也, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 高分子融体のガラス化過程: 構造とダイナミクス
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森勇介, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 ジペプチドの構造変化における反応経路と反応座標
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
2. 発表標題 過冷却水中における水素結合が形成するネットワーク構造と破断プロセスの関係
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>プラスチックの硬さに潜むシンプルな性質を世界で初めて明らかに。  <a href="https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2019/20191220_1">https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2019/20191220_1</a></p>
---

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	中村 壮伸 (Nakamura Takenobu) (10642324)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・主任研究員  (82626)	
研究分担者	川崎 猛史 (Kawasaki Takeshi) (10760978)	名古屋大学・理学研究科・講師  (13901)	
研究分担者	芝 隼人 (Shiba Hayato) (20549563)	東京大学・情報基盤センター・特任講師  (12601)	

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			
イタリア	フェデリコ2世・ナポリ大学			