

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年5月10日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究（S）

研究期間：2008～2012

課題番号：20226005

研究課題名（和文） 超高速化量子分子動力学法に基づくマルチレベルトライボロジーシミュレータの開発

研究課題名（英文） Development of Multi-level Tribology Simulator based on Ultra-accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

研究代表者

宮本 明 (MIYAMOTO AKIRA)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

研究者番号：50093076

研究成果の概要（和文）：

マイクロとメソ、マクロを含むトライボロジー現象を量子論に基づいて解析することができる、マルチレベルトライボロジーシミュレータを開発した。これは、超高速量子分子動力学法の開発や、粒子間相互作用ポテンシャル精密決定のための自動化プログラムの開発などによって、初めて可能となった。本シミュレータを実在系の自動車用エンジンオイル添加剤トライボケミカル反応に適用し、実験結果との比較によってその有効性を検証した。

研究成果の概要（英文）：

The multi-level tribology simulator was developed to analyze the tribology phenomenon containing microscopic, mesoscopic and macroscopic levels based on the quantum theory. This was realized for the first time by development of an ultra-accelerated quantum chemical molecular dynamics method, an automation program for precision determinations of interparticle interaction potentials, and so on. This simulator was applied to the tribochemical reaction of engine oil additives and validated by comparison with experimental results.

交付決定額

（金額単位：円）

|        | 直接経費        | 間接経費       | 合計          |
|--------|-------------|------------|-------------|
| 2008年度 | 57,600,000  | 17,280,000 | 74,880,000  |
| 2009年度 | 24,000,000  | 7,200,000  | 31,200,000  |
| 2010年度 | 24,000,000  | 7,200,000  | 31,200,000  |
| 2011年度 | 24,000,000  | 7,200,000  | 31,200,000  |
| 2012年度 | 24,000,000  | 7,200,000  | 31,200,000  |
| 総計     | 153,600,000 | 46,080,000 | 199,680,000 |

研究分野：機械工学

科研費の分科・細目：機械材料・材料力学

キーワード：マルチレベル、量子分子動力学、トライボケミカル、シミュレータ、摩擦

## 1. 研究開始当初の背景

トライボロジーに関する理論研究は、従来連続体に基づく機械工学的アプローチが主流であった。しかしながら、ナノ界面における摩擦・磨耗現象を対象としたナノトライボロジーの発展とともに、原子・分子レベルでの現象の理解が不可欠になっている。これに

対して、研究代表者や Landmann (Surf. Sci., 210 (1989) L177) らが、トライボロジー研究に分子動力学法を適用し、この分野における計算化学的研究が始まった。また近年では、高機能・低環境負荷の潤滑添加剤・磨耗防止剤の開発において急務となってきた現状を背景にして、摩擦界面における反応を伴う現

象、いわゆるトライボケミカル反応現象の解明が重要となってきた。量子論に基づくシミュレーションに大きな期待が寄せられるようになってきた。Moseyらにより、第一原理分子動力学法を活用した極圧条件下におけるリン酸亜鉛の化学反応ダイナミクスの解明というブレークスルーが成し遂げられているが (Science, 307 (2005) 1612)、第一原理分子動力学法は計算負荷が膨大なため、その適用はリン酸亜鉛単体の極圧下の反応ダイナミクスに留まっており、摩擦のダイナミクスを取り扱うことはできていない。そのため、実際の摩擦条件下におけるトライボケミカル反応ダイナミクスを直接検討することが可能な、より高速な量子論に基づく計算化学手法の開発が急務となっている。

これに対して研究代表者は、分子動力学法に第一原理量子化学計算に基づく高精度パラメータを導入した高精度トライボロジーシミュレータ TRIBOSIM の開発に成功し (平成 11 年度萌芽的研究)、さらには、第一原理分子動力学法と比較して 5000 倍以上も高速な Tight-Binding 量子分子動力学法を利用することで、トライボケミカル反応ダイナミクスの解明に成果を挙げてきた (平成 13-16 年度基盤研究 (A)、Appl. Surf. Sci., 244 (2005) 34)。また最近では、Tight-Binding 量子分子動力学法と古典分子動力学法をハイブリッド化することで、大規模複雑界面でのトライボケミカル反応ダイナミクスの解明に成功するなど (平成 16-19 年度基盤研究 (S)、J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 17872)、トライボケミカル反応の理論解明において先駆的な成果を挙げてきた。

また、計算手法の更なる高速化を目指して、化学反応を高速に取り扱える機能を付与した反応表現付分子動力学法を開発し、さらに遷移状態理論との組み合わせによって長時間スケールの反応ダイナミクス解析手法を確立し高分子重合反応に応用することに成功した。さらに最近、従来の量子化学分子動力学法よりも 1000 万倍も高速な超高速量子化学分子動力学法の開発に成功した。この手法は、量子計算の情報を分子動力学法のポテンシャル関数に逐次反映させ、効率のよい化学反応計算を実現する。このような新しいシミュレーション手法を用いることによって、計算で取り扱える化学反応スケールがマイクロからメソ領域にまで拡張されつつある。そこで、これまでのトライボロジー分野における先駆的な研究経験をベースに、このような新しく開発された独自の計算手法をトライボロジー分野に適用することによって、量子論からマイクロ・メソ・マクロ領域を包括するマルチレベルへのトライボケミカル反応シミュレータの展開が可能となってきたと考え、本研究を開始した。

## 2. 研究の目的

高信頼性・低環境負荷の自動車・機械装置の開発に向けて、高機能かつ無リン・無硫黄の潤滑添加剤・磨耗防止剤の開発が急務である。それら潤滑添加剤・磨耗防止剤の機能の本質を解明するためには、ナノ摩擦界面における被膜形成過程など化学反応をともなう現象解明が必須であり、トライボケミカル反応を解明可能な手法の確立が強く求められている。このような、化学反応を理論的に議論できる「量子論に立脚したトライボロジー研究」に対する産学界からの期待を背景に、平成 16-19 年度基盤研究 (S) において、「化学反応」と「機械的摩擦現象」の両方を取り扱うトライボケミカル反応シミュレータ Hybrid-Colors の開発に成功した。一方、この間に計算化学の方法論も目覚ましい進化を遂げ、従来の Tight-Binding 量子分子動力学法より 1000 万倍も高速な、超高速量子分子動力学法プログラムの開発に成功した。このプログラムを触媒分野に応用して、従来のシミュレーションの適用限界を飛躍的に高めることを立証している。この計算速度の格段の進歩と、これまで得られた成果を組み合わせることで、トライボケミカル反応ダイナミクスの理論解析に飛躍的な発展が期待できると考えた。そこで、超高速量子分子動力学法の開発によって初めて可能となった、量子論に基づいたマイクロとメソ、マクロを含む、世界初の「マルチレベルトライボロジーシミュレータ」を開発することで、新しい研究領域を切り開くことを目的とする。

## 3. 研究の方法

本研究では、超高速化量子分子動力学法に基づくマルチレベルトライボロジーシミュレータ (図 1) を実現する、下記の開発を行う。(1) 超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータの開発、(2) メソスケールでのトライボロジー現象を解明可能な反応表現付トライボロジーシミュレータの開発、(3) 時間発展加速化理論の開発、(4) 粒子間相互作用ポテンシャル精密決定の自動化プログラムの開発、(5) 化学反応表現付連続体力学シミュレータの開発、(6) エンジン添加剤のトライボケミカル反応機構解明への適用による有効性検証。

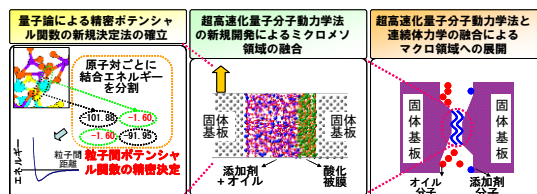


図 1 マルチレベルトライボロジーシミュレータの概略図

#### 4. 研究成果

##### (1) 超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータの開発

本研究開始以前に開発した超高速化量子分子動力学法は、電子状態計算部分が従来の第一原理的手法よりも 5000 倍以上高速化されており、分子動力学計算の 2000 ステップごとに行う場合には 1000 万倍という飛躍的な高速化が可能である。このような超高速計算手法は他に全く例が無く、研究代表者ら独自の手法である。しかしながら、当時はまだトライボロジー研究に必要な摩擦・せん断条件下でのシミュレーションを行うことができなかった。そこで研究代表者らが平成 16-19 年度基盤研究(S)で開発した、摩擦・せん断条件下を考慮したハイブリッド量子分子動力学シミュレータに実装されている二つの機能、①上方から系の一部を一定の圧力で圧縮する機能、②摩擦・せん断方向に一定の速度で系の一部をスライドさせる機能を新たに実装し、トライボロジー分野に特化した超高速量子分子動力学法を実現した。

##### (2) メソスケールでトライボロジー現象を解明可能な反応表現付トライボロジーシミュレータの開発

研究代表者らは、本研究開始以前に、トライボロジー現象の解明を原子・分子レベルで可能とする非平衡古典分子動力学トライボロジーシミュレータ、電子の授受を伴う化学結合の解離・形成を扱える Tight-Binding 量子分子動力学シミュレータ、およびこれらを統合したハイブリッド量子分子動力学シミュレータの開発と応用に成功している。しかしながら、これらの方法論では化学反応を量子論に基づいてあらわに取り扱うため、実際にシミュレーション可能な時間と空間スケールに限界があり、メソ/マクロ領域へ展開して実験系との直接的な対応をとるためには、少なくともマイクロメートルオーダー、マイクロ秒オーダーを取り扱えるように方法論を拡張する必要があった。そこで、ハイブリッド量子分子動力学シミュレータにおいて、最も計算時間のかかる反応過程の計算を確率論的手法に置き換えることで、計算速度を大幅に高速化できるメソスケール・反応表現付トライボロジーシミュレータを開発した。具体的には、シミュレーション中に原子間距離を監視し結合判定距離以内に原子が接近したときにポテンシャル関数を確率論的に切替えることにより、反応機構を分子動力学シミュレーションへ組込んだ。確率はあらかじめ量子論に従って決定することで、量子論に基づくメソスケール計算とした。本シミュレータの開発によって、マイクロメートルスケールでの化学反応に基づく潤滑皮膜形成過程を、正確にシミュレーションする

ことが可能となった。

##### (3) 時間発展加速化理論の開発

上記(2)のメソスケール対応シミュレータを用いた場合でも、速度定数の遅い化学反応を取り扱うには限界がある。そこで新たに遷移状態理論を導入することで、反応表現付トライボロジーシミュレータの結果を、マイクロ秒、ミリ秒など実際の時間スケールに対応付けることができる、時間発展加速化理論を開発した。この時間発展加速化理論は研究代表者ら独自の方法論であり、本来  $\Delta G_0$  の活性化エネルギーをもつ反応を  $\Delta G_1$  に減じて分子動力学シミュレーションを実行し、遷移状態理論から導き出される式 ( $\Delta t_{\text{real}} = \Delta t_{\text{MD}} \exp\{(\Delta G_0 - \Delta G_1)/RT\}$ ;  $T$  は温度、 $R$  は気体定数、 $\Delta t_{\text{MD}}$  は分子動力学シミュレーションの時間、 $\Delta t_{\text{real}}$  は変換した時間)により、フェムト秒・ピコ秒スケールのシミュレーション時間を実時間に対応付ける。すでに等核二原子分子の気相反応とメタロセン触媒による  $\alpha$ -オレフィン重合反応の速度解析への応用に成功していたことから、本研究ではこの手法と(2)で開発したメソスケール反応表現付トライボロジーシミュレータとの統合化を行った。ここでトライボロジー現象におけるトライボケミカル反応は多数の素過程よりなると考えられるが、そのようなトライボケミカル反応のメカニズムが表現できるように素反応過程を確率とポテンシャル関数の切り替えという形で実装した。この際、各素過程において反応原系と活性化エネルギーは、開発済みの Tight-Binding 量子化学プログラム Colors によって精密に決定される、粒子間相互作用ポテンシャルをもとに記述した。

##### (4) 粒子間相互作用ポテンシャル精密決定の自動化プログラムの開発

本研究開始以前に開発したハイブリッド量子分子動力学シミュレータは、従来の第一原理的手法と比較して 5000 倍以上も高速な量子分子動力学法として、リン酸エステル系潤滑添加剤のトライボケミカル反応の解明 (J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 17507) などに成果を上げていた。しかしトライボロジー分野が対象とする系の原子レベルモデルはさらに大規模で、より高速で安定な計算が要求されることから、量子論に基づく Colors プログラムから原子間相互作用ポテンシャルを精密に決定し、古典分子動力学法に適用する手法を開発した。すでに純鉄、酸化鉄、有機分子、希土類酸化物などへの適用には成功していた。本研究ではこの手法を自動化するプログラムを開発し、従来の第一原理的手法に対し、最高で 1000 万倍の高速化と計算の安定化を実現した。

##### (5) 化学反応表現付連続体力学シミュレータの開発

マクロレベルの視点では、摩擦面以外は一

般に連続体近似が可能であることから、実験と連携可能な大規模トライボシミュレータの開発には、有限要素法 (FEM) による弾塑性体計算および数値流体力学 (CFD) による流体計算の活用が効果的である。また、摩擦環境下では、マクロレベルのパラメータとなる粘性係数などの物性値が、温度や圧力、せん断速度など環境変数に大きく依存性し、結果として摩擦現象にも大きな影響を及ぼすことから、より高機能な潤滑剤設計のためにも、そのメカニズムを実際にシミュレーションし解析する必要がある。しかしながら、摩擦面における酸化皮膜の考慮に代表されるメソレベルの化学反応を取り入れた既存数値解法は皆無であり、高性能潤滑油の設計において上記の特性は経験則に基づいて導入せざるを得なかった。そこで界面における化学反応の計算に、従来の 1000 万倍もの高速化を達成した超高速化量子分子動力学法を適用することによって、化学反応を取り入れたハイブリッド化マクロレベル連続体力学シミュレータ FEM および CFD プログラムを開発し、分子レベルのナノトライボロジー物性値の非経験的予測シミュレータに適用した。

(6) エンジン添加剤のトライボケミカル反応機構解明への適用による有効性検証

代表的なフリクション低減用添加剤であるジアルキルジチオカルバミン酸モリブデン (Mo-DTC) のトライボケミカル反応について、上記で開発されたシミュレータを適用し有効性を検証した。一般に、Mo-DTC はエンジン内部の条件化において化学反応を起こし、 $\text{MoS}_2$  からなる潤滑被膜を形成することが知られている。そのような現象を再現できるか検証するとともに、実験で得られているデータとの整合性を確認した。シミュレーション結果と実験データを直接比較してシミュレーションの精度を高めるため、新規に開発した界面潤滑剤一分子解析のための和周波発生 SFG シミュレータ、基準振動解析に基づく IR ラマンスペクトルシミュレータ、および分子動力学法に基づく IR ラマンスペクトルシミュレータを活用し、シミュレーションパラメータの最適化を行った。

さらに、実在系添加剤の基油存在下におけるトライボケミカル反応についても、基油としてポリアルファオレフィン (PAO)、添加剤として高級脂肪酸や極圧剤のジアルキルジチオリン酸亜鉛 (ZnDTP あるいは ZDDP) から生成されるリン酸亜鉛について検討を行った。この際、実験との連携を可能とするために必要となる、実時間に対応する高速なメソ・マクロレベル摩擦摩耗シミュレータを、キネティックモンテカルロ法に基づき新たに開発した。これに、超高速化量子分子動力学法計算に基づく摩擦面の物性を導入することにより、世界初の「実験融合マルチレベ

ルトライボロジーシミュレータ」を構築することができた。

これらの実験データについては、トライボロジー実験研究において世界的にも第一人者であるリヨン工科大学の Jean Michel Martin 教授に提供とアドバイスを頂き、より実践的な検討を行っている。本基盤研究 (S) 終了後も、引き続き共同でシミュレータの応用研究を進めている。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 8 件)

① Jean Michel Martin, Tasuku Onodera, Maria-Isabel De Barros Bouchet, Nozomu Hatakeyama, and Akira Miyamoto, “Antiwear Chemistry of ZDDP and Calcium Borate Nano-additive. Coupling Experiments, Chemical Hardness Predictions, and MD Calculations,” *Tribol. Lett.*, 査読有, 50, (2013), 95-104.

DOI: 10.1007/s11249-013-0108-z

② Tasuku Onodera, Jean Michel Martin, Clotilde Minfray, Fabrice Dassenoy, and Akira Miyamoto, “Antiwear Chemistry of ZDDP: Coupling Classical MD and Tight-Binding Quantum Chemical MD Methods (TB-QCMD),” *Tribol. Lett.*, 査読有, 50, (2013), 31-39.

DOI: 10.1007/s11249-012-0063-0

③ Shandan Bai, Tasuku Onodera, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Hiromitsu Takaba, Momiji Kubo, and Akira Miyamoto, “Friction Reduction Mechanism of Hydrogen- and Fluorine-Terminated Diamond-Like Carbon Films Investigated by Molecular Dynamics and Quantum Chemical Calculation,” *J. Phys. Chem. C*, 査読有, 116, (2012), 12559-12565.

DOI: 10.1021/jp300937n

④ Tasuku Onodera, Takanori Kuriaki, Shandan Bai, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momiji Kubo, and Akira Miyamoto, “Influences of Film Deposition Condition on Friction of Diamond-Like Carbon Film: A Theoretical Investigation,” *Tribol. Online*, 査読有, 5, (2010), 173-180.

DOI: 10.2474/trol.5.173

⑤ Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Fabrice Dassenoy,

Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Momoji Kubo, Jean-Michel Martin, and Akira Miyamoto, “A Computational Chemistry Study on Friction of h-MoS<sub>2</sub>. Part II. Friction Anisotropy,” *J. Phys. Chem. B*, 査読有, 114, (2010), 15832-15838.

DOI: 10.1021/jp1064775

⑥Tasuku Onodera, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, “Development of a Quantum Chemical Molecular Dynamics Tribochemical Simulator and Its Application to Tribochemical Reaction Dynamics of Lubricant Additives,” *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 査読有, 18, (2010), 034009.

DOI: 10.1088/0965-0393/18/3/034009

⑦Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, “Tribochemical Reaction Dynamics of Molybdenum Dithiocarbamate on the Nascent Iron Surface: A Hybrid Quantum Chemical/Classical Molecular Dynamics Study,” *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 査読有, 10, (2010), 2495-2502.

DOI: 10.1166/jnn.2010.1399

⑧Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Fabrice Dassenoy, Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Jean-Michel Martin, and Akira Miyamoto, “A Computational Chemistry Study on Friction of h-MoS<sub>2</sub> Part I: Mechanism of Single Sheet Lubrication,” *J. Phys. Chem. B*, 査読有, 113, (2009), 16526-16536.

DOI: 10.1021/jp9069866

⑨Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, “Influence of Nanometer Scale Film Structure of ZDDP Tribofilm on Its Mechanical Properties: A Computational Chemistry Study,” *Appl. Surf. Sci.*, 査読有, 256, (2009), 976-979.

DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.04.205

⑩Akira Endou, Tasuku Onodera, Sayaka Nara, Ai Suzuki, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, “A

Theoretical Study of Dynamic Behavior of Diphenyldisulphide Molecule on Fe Surface: Novel Ultra-Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach,” *Tribol. Online*, 査読有, 3, (2008), 280-284.

DOI: 10.2474/trol.3.280

⑪ Clotilde Minfray, Tasuku Onodera, Thierry Le Mogne, Sayaka Nara, Shuko Takahashi, Hideyuki Tsuboi, Michihisa Koyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, Jean-Michel Martin, and Akira Miyamoto, “Experimental and Molecular Dynamics Simulations of Tribochemical Reactions with ZDDP: Zinc Phosphate-Iron Oxide Reaction,” *Tribol. Trans.*, 査読有, 51, (2008), 589-601.

DOI: 10.1080/10402000802011737

⑫Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Clotilde Minfray, Jean-Michel Martin, and Akira Miyamoto, “A Theoretical Investigation on the Abrasive Wear Prevention Mechanism of ZDDP and ZP Tribofilms,” *Appl. Surf. Sci.*, 査読有, 254, (2008), 7976-7979.

DOI: 10.1016/j.apsusc.2008.04.057

⑬Yusuke Morita, Tasuku Onodera, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, Takatoshi Shin-yoshi, Noriaki Nishino, Atsushi Suzuki, and Akira Miyamoto, “Development of a New Molecular Dynamics Method for Tribochemical Reaction and Its Application to Formation Dynamics of MoS<sub>2</sub> Tribofilm,” *Appl. Surf. Sci.*, 査読有, 254, (2008), 7618-7621.

DOI: 10.1016/j.apsusc.2008.01.123

⑭Yusuke Morita, Toshiaki Shibata, Tasuku Onodera, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, and Akira Miyamoto, “Effect of Surface Termination on Super-Low Friction of Diamond Film: A Theoretical Study,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, 査読有, 47, (2008), 3032-3035.

DOI: 10.1143/JJAP.47.3032

⑮Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Momoji Kubo, Takatoshi Shin-yoshi,

Noriaki Nishino, Atsushi Suzuki, and Akira Miyamoto, "A Theoretical Investigation on Dynamic Behavior of the Molybdenum Dithiocarbamate Molecule in the Engine Oil Phase," Tribol. Online, 査読有, 3, (2008), 80-85.  
DOI: 10.2474/trol.3.80

〔学会発表〕(計130件)

- ①宮本 明、物性推算のなかの分子シミュレーション、化学工学会、2012年9月20日、東北大学(招待講演)
- ②宮本 明、Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach for Tribochemistry、Tribochemistry Hagi、2011年10月27日、山口(招待講演)
- ③宮本 明、実践的コンピュータ化学から見た表面科学の魅力、日本表面科学会、2010年3月10日、東北大学(招待講演)
- ④宮本 明、New Horizons in Tribology: The Computational Chemistry Paradigm、World Tribology Congress、2009年9月9日、京都(招待講演)
- ⑤宮本 明、産業革新のための実践的コンピュータ化学: 現状と展望、化学工学会、2008年9月24日、東北大学(招待講演)

〔その他〕

- ①マスメディアによる情報発信  
2011年11月30日、放送大学科目「物質・材料工学と社会」の第14回、「材料評価とコンピュータ設計」に研究代表者がゲスト解説者として出演、収録された。2011年度に開設されて以降、毎年度放送されている。
- ②アウトリーチ活動  
高校生を対象とした大規模な講義ライブ「夢ナビライブ」に参加した。2011年7月12日に大阪会場、2011年7月16日と2012年7月14日には東京ビッグサイトにて、研究代表者が本研究に関する成果を含む講義を行った。
- ③その他の行事  
2008年8月29日、研究代表者の研究室が主催するコンビナトリアル計算化学講習会「量子分子動力学法の講義—応用範囲と適用限界」において、約30名の受講者に対し、本研究に関連する成果の一部を紹介した。本講習会は、方法論や応用例の紹介のみならず、実際にコンピュータを用いた講習会も兼ねたものとなっており、好評であった。
- ④ホームページ  
研究代表者の研究室ホームページにて学会発表資料・リストを公開中で、一部動画も公開するなど、よりアピールしやすいような工夫もしている。

[http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/gyouseki\\_top.htm](http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/gyouseki_top.htm)

## ⑤パンフレットの配布

研究代表者及び分担者によって、数多くの国際シンポジウム、国際展示会、招待講演、他大学での講義にて、日英両言語の研究内容を紹介するパンフレットを配布し(累計頒布部数6000部以上)、研究成果をアピールしているほか、パンフレットは研究室ホームページでも公開している。

<http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/whatiscomb.html>

## ⑥ソフトウェアの市販化

研究代表者の研究室における研究成果の一部は、(株)菱化システムやペガサスソフト(株)などのソフト会社を通じ、市販ソフトウェアとして国内外の大学、企業などに提供されている。

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

宮本 明 (MIYAMOTO AKIRA)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授  
研究者番号: 50093076

### (2) 研究分担者

高羽 洋充 (TAKABA HIROMITSU)  
東北大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 80302769  
遠藤 明 (ENDO AKIRA)  
東北大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 90344704  
坪井 秀行 (TSUBOI HIDEYUKI)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・准教授  
研究者番号: 20375182  
古山 通久 (KOYAMA MICHIHISA)  
東北大学・大学院工学研究科・助教  
研究者番号: 60372306  
畠山 望 (HATAKEYAMA NOZOMU)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・准教授  
研究者番号: 50312666  
鈴木 愛 (SUZUKI AI)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・助教  
研究者番号: 40463781  
三浦 隆治 (MIURA RYUJI)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・助教  
南雲 亮 (NAGUMO RYO)  
東北大学・未来科学技術共同研究センター・助教

### (3) 連携研究者

該当なし