

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24年5月31日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21760077

研究課題名（和文）負の剛性相を含有する次世代ナノコンポジットの変形モデリング

研究課題名（英文）Modeling of deformation of next-generation nanocomposites including negative stiffness phases

研究代表者

君塚 肇（KIMIZUKA HAJIME）

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：60467511

研究成果の概要（和文）：

ポリマー中にナノ粒子を分散させたナノコンポジットの開発には、要求された機械的特性・熱的特性を満足するためにフィラー（介在物）種の機械的特性を積極的に制御し、複合化による強化機構を定量的に把握することが求められる。本研究では、ナノコンポジットを構成する母相、介在物ならびにその界面領域の力学特性を記述・理解するための、マルチスケールに渡るモデリング手法の枠組みを構築した。

研究成果の概要（英文）：

For the development of nanocomposites, it is required to understand the strengthening mechanism of composite materials at the nanoscale, in which nanoparticles are distributed within a polymer matrix. In this study, we developed a framework for modeling based on a multiscale approach to describe and understand the mechanical properties of matrix, filler and their interfaces in nanocomposites.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2010年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学，機械材料・材料力学

キーワード：ナノ複合材料，拡散・変形，分子動力学法，フェーズフィールド法，有限要素法

1. 研究開始当初の背景

ポリマー中にナノ粒子を分散させたポリマーナノコンポジットでは、少量のナノ粒子（フィラー）の添加であっても、添加しない場合と比較して、弾性率、引張り強さ、曲げ強度等の機械的特性の向上、および熱伝導率、熱安定性等の熱的特性向上が見られる。さらには、添加するナノ粒子によっては電気伝導性、磁気特性、ガスバリア性等の付加的な機能を与えることも可能である。近年、これら

の特徴を利用して、ポリマーナノコンポジットが、自動車部品、電気・電子部品、建材、医療材料等に利用されている。

上記の特性発現に関してはポリマー母相に添加するフィラーが重要な役割を担っており、これらには従来シリカ、クレイ、カーボンブラック、金属微粒子等が用途に応じて使用されている。またナノレベルの複合化を促して一層の性能向上を図るために、様々なナノフィラー（カーボンナノチューブ等）の利用も注目されている。

ここで近年、工業的に未利用の弾性領域に属する材料をフィラーとして介在させたコンポジットが、従来とは異なる特異な機械的特性を示し得ることが報告されている。その1つの例が負剛性を示す物質の介在である。負の剛性(negative stiffness)を持つ材料は、外部変形に対して、反力が系の変形を増大させる方向に生じる特徴を持つ。負剛性のメカニズムを材料内部に有する一部の構造体は、変位拘束境界のもとで安定に存在しつつ、体積弾性率が負を示し得る。そして負剛性材料を、正の剛性を有する材料とともに用いることで、この正の剛性を相殺もしくは減殺して応力応答の低減を図ることが期待できる。

このようにフィラー種の機械的特性を積極的に制御し、これまで未利用であった材料を含めた上で設計を行うことで、より優れた性能を有する新規のコンポジット(本研究では「次世代ナノコンポジット」と称する)が開発されると期待できる。しかしながら、一般にフィラー添加によるコンポジットの機械的特性・熱的特性の変化のメカニズムに関してはいまだ十分な理解が得られておらず、現場での開発は絨毯爆撃的な試行錯誤手法によって行われているのが現状である。

2. 研究の目的

本研究では、ナノコンポジットを構成する母相、介在物ならびにその界面領域の力学特性を記述・理解するための、マルチスケールに渡るモデリング手法の枠組みを構築することを目的とする。特に構造材料としての応用を考えた場合に重要となる機械的特性・熱的特性に関して、ナノ粒子がマクロ特性に与える影響を明らかにする。

ポリマーナノコンポジットの機械的特性、熱的特性のモデリングに関する研究は既に実施されている。これらは主に、分子レベルの解析による分子モデリング、連続体レベルの解析による構成式モデリングに大別される。前者は、原子分子の運動を直接取り扱うため、原理的には予測的モデリングが可能であるが、現実には時間・空間スケールの大きな壁があり、常識的なひずみ速度、空間スケールでの計算は困難である。最も深刻なのは、特にポリマーの計算で考慮すべきエントロピー効果の評価が難しいことである。一方後者は、時間・空間スケールの問題はないが、解析が経験的に求められた構成式によっており、十分な知見が得られていない新しいコンポジット材料が対象となるときは適用が難しく、予測的モデリングという意味では役割を果たさない。

そこで、本研究では、それぞれの長所を活かしたマルチスケールモデリング手法を開発する。具体的には、原子分子の運動が物理

を支配しているスケール領域や場所(ナノ粒子およびナノ粒子とポリマーマトリックスの界面)では、原子分子を直接取り扱う分子モデリング手法(分子動力学法(MD法)、反応経路探索法(NEB法))を用いてナノ粒子の変形、界面の強度の解析を実行する。そして、その情報を参照しながら、原子分子の運動を統計的に扱うことが許されるもう少し大きな時間・空間スケール領域(ナノ粒子が1000~10000個程度含まれる領域)で、場の発展を取り扱うことのできるフェーズフィールド法および動的密度汎関数法を用いて、ナノコンポジットの変形、粒子分散状態などの内部構造変化の解析を実行する。また、マクロなナノコンポジット構造体の変形を考える場合には、マクロな境界条件のもとで有限要素計算を実施し、解析に必要な応力-ひずみ関係は下層レベルの解析から取得する。

3. 研究の方法

本課題においては、ポリマー系ナノコンポジットを構成する母相、介在物ならびにその界面領域に対して、1) 力学的特性を記述するためのモデリング手法の構築と、2) これらを用いた、ナノ粒子ならびに異種分子が系のマクロ特性に与える影響の解明を実施する。具体的には構成物質(母相、フィラー、界面領域)の力学特性の情報獲得およびマルチスケールに渡るシミュレーション手法の構築に関して、以下の手法を用いる。

- (1) ポリマー系ナノコンポジットを分子・原子レベルで解析するための原子間相互作用を確立する。ナノ粒子(ここではナノカーボン)、ポリマー分子鎖内の結合相互作用をうまく表現することができるボンドオーダー型相互作用と、ポリマー分子間および分子-ナノ粒子間の非結合相互作用(ファンデルワールス相互作用)をうまく表現することができるLennard-Jones型相互作用の長所を取り入れた相互作用を提案する。
- (2) (1)で構築した原子間相互作用を用いて、ナノ粒子の機械的性質(外力に対する弾・塑性変形応答)をNEB計算によって獲得する。
- (3) 次に、MD計算を用いて、ナノ粒子とポリマーマトリックスの界面の機械的特性を調べる。さらに、ポリマーマトリックスの機械的性質(外からの熱力学的仕事に対する応答)をMD計算を用いて調べる。このとき、長時間MD計算と統計力学的処理が必要となる。
- (4) 得られた知見に基づいてフェーズフィールド法および動的密度汎関数法の支配方程式となる、場の発展方程式の理論

モデルを構築と、それに基づくプログラミングを行う。さらには、有限要素計算を実行する上で、当該手法との連携を図るための手法構築を行う。

- (5) ナノ粒子の中で詳細情報が得られていない材料の大変形挙動に関して、第一原理計算を用いて評価する。有限要素法等の上層レベルの解析において必要となるパラメータについては、第一原理計算により得られた各種物性値（エネルギー、密度、弾性定数等）を適宜活用する。

以上に基づいたミクロスケールおよびメゾスケールにおけるフェーズフィールド法、動的密度汎関数法等を用いて、ナノ粒子および異種分子がポリマーナノコンポジットのマクロな機械的特性に与える影響について評価、検討する。さらに、ナノ粒子の機械的特性、ナノ粒子とポリマーとの界面相互作用、ナノ粒子・ポリマーの分子構造等の様々なミクロ因子がマクロな機械的特性に与える影響を調べるため、それぞれの条件を系統的に変化させながらナノコンポジット系におけるマクロ挙動を評価する。

4. 研究成果

上述の研究方法に基づき、研究期間内で整備を進めた原子・分子レベル解析コードおよびメゾスケール解析コードを用いて、以下の項目に対して具体的な解析を行い、その妥当性を評価した。得られた成果を以下にまとめる。

- (1) ポリマー・ナノカーボン系材料の非経験的モデリング

ポリマー、ナノ粒子および両者の界面における原子間相互作用を統一かつ非経験的に扱いながら、全体系のダイナミクスを原子・分子レベルで解析する非経験的モデリングの枠組みを提案した。具体的には、原子間の結合相互作用および非結合相互作用を同時に考慮することが可能な反応性ポンドオーダーポテンシャル (AIREBO ポテンシャル) を採用し、原子シミュレーション手法により種々の温度・圧力条件におけるナノ粒子の相互作用性を評価した。本手法は注目する原子の種類と配置情報のみを拠り所としていることから、ポリマーやナノ粒子の区別を必要としないモデリングが可能である。また結合および非結合相互作用さらに結合の生成と解離を継目なく記述することができる。本研究では、任意の炭化水素系におけるポリマー・ナノカーボン系材料を対象にして、事例研究としていくつかの適応解析例を示した。本研究により得られた知見は以下の通りで

ある。

- ① ダイヤモンドおよびグラファイトの構造特性および弾性特性の評価を実施した。本モデリング手法を用いることにより、炭素原子の配置情報のみにより結合状態を判断し、構造特性および弾性特性を適切に表現し得ることがわかった。また従来のポンドオーダーポテンシャルでは扱えないグラファイトの層内相互作用（非結合相互作用）を特定の情報付加を必要とせずに、記述できることを確認した。
 - ② 炭化水素系（メタン、エタン、エチレン）の蒸発エンタルピーおよび結合エンタルピーを評価した。本モデリング手法を用いることにより、実験などにより報告されている物性値を適切に表現できることを確認した。また、炭化水素系の結合・非結合相互作用を記述し得ることがわかった。
 - ③ カーボン材料と炭化水素の混合系を対象として、グラファイトに結合したヘキサンの引張り変形を解析した。本手法により、カーボン材料-炭化水素間の相互作用も統一的に扱え、グラファイトとヘキサン間の結合強度はヘキサン内の炭素間強度と同程度となることが確認された。また反応性ポンドオーダーポテンシャルの特徴でもある結合の解離を記述できることを確認した。
 - ④ ポリマー・ナノ粒子界面モデルとしてポリエチレンのマトリクス中にカーボンブラックを添加した系の界面近傍を想定し、ポリエチレンおよびグラファイトからなる界面の力学特性を評価した。界面間に生成するグラフト結合により、系の力学特性が大きく変化することを確認した。これは、グラフト結合の面密度を調整することにより界面系の強度が制御され得ることを示唆している。
- (2) 高圧下における C60 ポリマー複合体形成過程に関する原子論的モデリング

本研究では、AIREBO ポテンシャルを採用した分子動力学計算により、様々な温度・圧力条件における C60 凝集体の挙動、ならびに結合性変化および重合プロセスの解析を行った。また、C60 の重合反応解析に先立ち、解析の高速化を図るために AIREBO ポテンシャル計算の並列化を行った。本ポテンシャルを元に、C60 分子および C60・C8H8 結晶を原子レベルでモデル化し、様々な温度・圧力条件における重合プロセスの解析を行った。更に、系の構造探索効率を向上させるための手法として自己誘導分子動力学 (SGMD) 法を採用し、アルゴン溶液の結晶化や C60 分子の重合

プロセスに適用した。以下に得られた知見を示す。

- ① Tersoff ポテンシャルおよび AIREBO ポテンシャルに関して、粒子登録法および領域分割法を採用することにより、両ポテンシャル計算のプログラムをメッセージパッシング法に基づき並列化した。特に、領域分割法に基づく三体間力(および四体間力)の計算の整合性を保つために、マージン領域に属する原子を起点とする近接粒子リストを別途作成し、各プロセス内で相互作用計算の欠落を補えるように改良した。その結果、Tersoff ポテンシャル計算に関して、110592 原子系において 8 プロセスの並列計算で 4.1 倍の速度向上が得られた。一方、AIREBO ポテンシャル計算に関しては 8 プロセスの並列計算で 2.8 倍の速度向上が得られた。
- ② AIREBO ポテンシャルを C60 の重合反応解析へ適用した。本解析では温度の上昇に伴い、C60 分子中の炭素原子の熱振動が活発になり、個々の C60 分子はその構造を保ちながら系内で回転する挙動が観察された。より高い温度では、C60 分子の回転がより活発になることで、C60 分子間の炭素原子が単位時間内に結合相互作用を及ぼしあう配置をとる機会が増加し、C60 分子間の結合形成が促進された。また、圧力の増加に伴い、C60 分子間の距離が縮まることにより、C60 分子間で炭素原子が結合相互作用を及ぼす距離内に入り、C60 分子間で結合が形成される挙動が観察された。より高い圧力条件において C60 分子間で形成される結合の数が多くなる傾向が得られたことから、圧力印加により C60 分子間の結合形成における見かけの活性化エネルギーが低下していることが示唆された。本解析では AIREBO ポテンシャルを C60 の重合反応解析へ適用することにより、C60 分子間における結合形成挙動の温度・圧力依存性を原子レベルから定量的に評価できることが分かった。
- ③ 面心立方構造状に C60 分子を配置した単結晶中の八面体格子間位置にキュバン(C8H8)を挿入した C60・C8H8 結晶の重合反応解析を行った。高温下ではキュバンが C8H8 の異性体であるバレレンに変化し、更に圧力印加により、バレレンが C60 分子と共有結合を形成した。特に圧力が 10 GPa の系においてバレレンが複数個(2~4 個)の C60 分子と結合することで、多様な架橋形態によるネットワーク構造を形成する様子を確認することができた。この挙動は C60 分子間で直接結合する挙動が見られない条件下においても確認さ

れた。本解析により、C60 単結晶において結合が確認されなかった温度・圧力条件下でも、キュバン等の炭化水素分子を添加することによって C60 はより容易にネットワーク構造を形成し得ることを示唆した。

- ④ 系の構造探索効率を向上させるための手法として SMGD を使用し、事例研究としてアルゴン溶液の結晶化に適用した。その結果、従来の MD と比較して約 45 倍ほどの現象の加速に成功した。また、SGMD を C60 分子の圧力誘起重合化に適用した。973 K, 1173 K では全ての圧力条件において従来の MD と比較して結合数の増加が確認できた。一方、圧力が高くなるにつれて結合形成の頻度が減少した。これは C60 間の結合数が増加するにつれて相互作用範囲内で結合し得る炭素原子が制限されたことに起因する。SGMD は AIREBO ポテンシャルにも適用可能であることを確認し、C60 分子の重合反応における結合形成過程を促進することに成功した。

- (3) 粗視化粒子モデルに基づく高分子鎖の平衡化手法の検討

本研究では、高分子鎖の平衡化を促進するため、double-bridging-MD hybrid (DBH) 法と自己誘導分子動力学(SGMD)法の 2 つを採用し、ビーズ・スプリングモデルに基づいて高分子鎖を粗視化モデル化した上で分子動力学法による平衡化シミュレーションを行った。更に、分子構造の評価を通して手法の有効性について確認した。

- (4) 動的密度汎関数法によるブロック共重合体の相構造解析

本研究では動的密度汎関数法を用いて、ブロック共重合体及び添加物の混合系における相分離挙動を解析した。解析対象のブロック共重合体は 2 種類のブロック状の副分子鎖が結合したジブロック共重合体とし、添加物は鎖長が異なる線状重合体とした。本研究により得られた知見は以下の通りである。

- ① ジブロック共重合体系において副分子鎖の体積分率及び副分子鎖間の非相溶性が増すに従い、段階的に無秩序相、球状相、ジャイロイド相、ラメラ相に遷移し、3 次的に多様な相構造が観察された。これは実験により報告されている傾向と定性的に一致するものである。
- ② 無秩序構造をとる A4B16 ジブロック共重合体系(副分子鎖 A の体積分率が 0.2)に、一方の成分に対して相溶、他方の成分に対して非相溶性を持つ添加物を

加えた場合、ジブロック共重合体を構成する各成分が凝集し、相分離が生じることを確認した。少量成分 (A 成分) に対して相溶かつ多量成分 (B 成分) に対して非相溶性を持つ添加物を加えた系では逆の性質を持つ添加物に比べて相分離が生じやすいことがわかった。また本添加物の添加量が増すに従い、系の構造が無秩序相、球状相、紐状相に変化することが観察された。

- ③ 上記のジブロック共重合体系に対して同種の添加物を 20% 添加した条件において、添加物の鎖長を変化させたところ、紐状相から球状相への相構造の変化が観察された。この相変化を調べるにあたり鎖長の短い場合において添加物同士の相溶性を強めたところ、鎖長の長い添加物と同様の球状構造が生じた。これにより、この相変化は添加物同士の凝集性の増加が影響していることが確認された。また添加量が少ない系において、添加物の鎖長が長い方が短い場合に比べて、少量で相分離を誘起することがわかった。

- (5) 第一原理計算に基づく単結晶材料の高速弾性の評価と非線形有限要素解析への応用

高応力下におけるフィラー材料の変形特性の解析のために、第一原理密度汎関数法に基づく有限要素解析を採用し、非線形弾性大変形状態における構成関係を取り入れた高精度な評価を可能とした。更に、構築したモデリング手法に基づいて、種々の無機結晶系 (C, Al, Fe, Mg 等) を対象として、第一原理密度汎関数法計算に基づく非線形弾性構成式の構築を行った。また、本構成式を業界標準的な有限要素法コードにソフトウェア実装することで、一般的な応力・境界条件の下での介在物材料の変形解析を実現し、その有効性を評価した。その結果、第一原理計算と同程度の精度の応力-ひずみ応答が低い計算負荷で獲得できることを確認した。

- (6) 母相中の異種粒子拡散のモデリング

粒子描像による反応モデリング手法に基づいて、種々の母相中の異種原子・粒子の拡散挙動を評価した。特に軽量元素の運動や長時間スケールの拡散過程が支配的となる系に対して、拡散定数および活性化エネルギー等を原子レベルで定量的に評価し、当該手法の有効性を評価した。また、低頻度事象に対する効率的な解析を実施するために原子シミュレーションの加速法に関する検討を行った。

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 7 件)

(1) A. Ishii, H. Kimizuka, S. Ogata, Multi-replica molecular dynamics modeling, Computational Materials Science, 査読有, Vol. 54, (2012), 240-248

(2) H. Kimizuka, S. Ogata, Slow diffusion of hydrogen at a screw dislocation core in alpha-iron, Physical Review B, 査読有, Vol. 84, (2011), 024116-1-6

(3) M. Tane, S. Nakano, R. Nakamura, H. Ogi, M. Ishimaru, H. Kimizuka, H. Nakajima, Nanovoid Formation by Change in Amorphous Structure through the Annealing of Amorphous Al203 Thin Films, Acta Materialia, 査読有, Vol. 59, (2011), 4631-4640

(4) H. Kimizuka, H. Mori, S. Ogata, Effect of Temperature on Fast Hydrogen Diffusion in Iron: A Path-Integral Quantum Dynamics Approach, Physical Review B, 査読有, Vol. 83, (2011), 094110-1-7

(5) 森 英喜, 君塚肇, 尾方成信, Microscopic Phase-Field モデルを用いた BCC 鉄の刃状およびらせん転位芯構造とパイエルス応力の評価, 日本金属学会誌, 査読有, Vol. 75, (2011), 104-109

(6) 牛田裕己, 尾方成信, 君塚肇, 分子動力学法による fcc 結晶の局所せん断変形に対する安定性の評価, 材料, 査読有, Vol. 60, (2011), 71-78

(7) N. Toda, H. Kimizuka, S. Ogata, DFT-based FEM analysis of nonlinear effects on indentation process in diamond crystal, International Journal of Mechanical Science, 査読有, Vol. 52, (2010), 303-308

[学会発表] (計 35 件)

(1) 君塚肇, 量子揺らぎを考慮した金属中の水素拡散・捕捉特性に関する原子論的研究, 日本物理学会第 67 回年次大会(招待講演), 2012. 3. 26, 関西学院大学

(2) 君塚肇, 松原和輝, 尾方成信, 第一原理計算によるマグネシウム単結晶の非線形弾性定数の評価, 日本機械学会関西支部第 87 期定時総会講演会, 2012. 3. 17, 関西大学

(3) 猪原彰大, 君塚肇, 尾方成信, 経路積分分子動力学法に基づく鉄中水素の拡散経路解析, 日本機械学会関西学生会平成 23 年度学生員卒業研究発表講演会, 2012. 3. 15, 関西大学

(4) 西野隆博, 君塚肇, 尾方成信, 第一原理計算に基づく単結晶材料の高次弾性の評価と非線形有限要素解析への応用, 日本機械学会関西学生会平成 23 年度学生員卒業研究発表講演会, 2012. 3. 15, 関西大学

(5) 大饗修也, 君塚肇, 尾方成信, Al2O3 多形における原子挙動と局所構造の分子動力学解析, 日本機械学会関西学生会平成 23 年度学生員卒業研究発表講演会, 2012. 3. 15, 関西大学

(6) H. Kimizuka, Quantum Effects on Diffusion and Trapping of Hydrogen in BCC Iron: A Path-Integral Molecular Dynamics Study, Workshop on Physics of Hydrogen in Materials, 2012. 1. 31, Osaka

(7) 君塚肇, 尾方成信, 鉄中粒界における水素原子の捕捉・拡散過程の量子効果, 日本金属学会 2011 年秋期大会, 2011. 11. 9, 宜野湾(沖縄)

(8) H. Kimizuka, S. Ogata, Grain-Boundary Diffusion and Segregation of Hydrogen in Iron: A Path-Integral Molecular Dynamics Study, Conference on Computational Physics 2011, 2011. 10. 30, アメリカ・ガトリンバーグ

(9) 君塚肇, 尾方成信, BCC および FCC 鉄における水素の量子拡散と捕捉ダイナミクス, 日本機械学会第 24 回計算力学講演会, 2011. 10. 8, 岡山大学

(10) H. Kimizuka, S. Ogata, Path-Integral Evaluation of Hydrogen Diffusion at Grain Boundaries in Iron, EUROMAT 2011, 2011. 9. 12, フランス・モンペリエ

(11) H. Kimizuka, S. Ogata, Path-Integral Evaluation of Free-Energy Profile for Hydrogen Diffusion around Grain Boundaries in Iron, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials, 2011. 7. 20, 東京大学

(12) 君塚肇, 山田和弘, 尾方成信, 経路積分計算に基づく Fe 粒界における水素拡散の

自由エネルギープロファイル解析, 日本材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2011. 5. 23, 大阪大学

(13) 真鍋良輔, 君塚肇, 尾方成信, 第一原理計算に基づく結晶材料の非線形弾性構成方程式の構築, 日本材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2011. 5. 23, 大阪大学

(14) 脇園浩史, 君塚肇, 尾方成信, 高圧下における C60 ポリマー複合体形成過程に関する分子動力学解析, 日本材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2011. 5. 23, 大阪大学

(15) 新家衛, 君塚肇, 小沢拓, 尾方成信, 粗視化粒子モデルに基づく高分子鎖の平衡化手法の検討, 日本材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2011. 5. 23, 大阪大学

(16) S. Ogata, H. Kimizuka, First-principle Constitutive Equation for Nonlinear Elasticity, Materials Research Society (MRS) 2010 Fall Meeting, 2010. 11. 29, アメリカ・ボストン

(17) H. Kimizuka, H. Mori, S. Ogata, Quantum Dynamics Study of Hydrogen Diffusion in Iron with Lattice Defects, 5th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2010), 2010. 10. 4, ドイツ・フライブルグ

(18) 君塚肇, 山田和弘, 尾方成信, BCC 鉄における水素の粒界・転位・表面拡散の量子動力学, 第 20 回日本 MRS 学術シンポジウム, 2010. 12. 21, 横浜

(19) 君塚肇, 山田和弘, 森英喜, 尾方成信, 鉄における水素の拡散・捕捉現象の量子動力学シミュレーション, 第 24 回分子シミュレーション討論会, 2010. 11. 24, 福井

(20) 君塚肇, 森英喜, 尾方成信, 量子揺らぎを考慮した Fe 結晶中の格子欠陥近傍における水素状態解析, 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性関係), 2010. 9. 23, 大阪府立大学

(21) 山田和弘, 君塚肇, 尾方成信, 経路積分分子動力学法による鉄中の転位近傍における水素挙動解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 2010. 9. 23, 北見工業大学

(22) 毛利圭佑, 森英喜, 君塚肇, 尾方成信,

鉄中炭素挙動と炭素が鉄の力学的特性に与える影響の原子レベル解析, 日本機械学会第23回計算力学講演会, 2010.9.23, 北見工業大学

(23) 尾方成信, 君塚肇, 牛田裕己, メタダイナミクス法による固体の局所安定性の評価, 日本計算工学会第15回計算工学講演会, 2010.5.26, 福岡

(24) 君塚肇, 森英喜, 尾方成信, 格子欠陥を含む鉄中の水素拡散の量子力学的研究, 日本材料学会第15回分子動力学シンポジウム, 2010.5.21, 札幌

(25) 脇園浩史, 君塚肇, 尾方成信, 高圧下におけるC60の重合反応挙動の原子レベル解析, 日本材料学会第15回分子動力学シンポジウム, 2010.5.21, 札幌

(26) 竹中唯太, 森英喜, 尾方成信, 君塚肇, 転位-固溶物相互時間発展の大規模並列フェーズフィールド解析, 日本材料学会第15回分子動力学シンポジウム 2010.5.21, 札幌

(27) 伊東勝道, 尾方成信, 君塚肇, 原子密度汎関数理論における多結晶体の生成及び変形解析, 日本材料学会第15回分子動力学シンポジウム, 2010.5.21, 札幌

(28) H. Kimizuka, N. Toda, S. Ogata, DFT-Based FEM Study on Nonlinear and Anisotropic Behavior of Indented Single-Crystal Diamond, 2010 M&M International Symposium for Young Researchers, 2010.3.2, アメリカ・カリフォルニア工科大学

(29) 君塚肇, 戸田直大, 尾方成信, 第一原理密度汎関数法に基づくダイヤモンド結晶体の弾性大変形挙動の有限要素解析, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009.10.10, 金沢大学

(30) 石井明男, 牛田裕己, 君塚肇, 尾方成信, マルチレプリカ分子動力学モデリング法とその応用, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009.10.10, 金沢大学

(31) 君塚肇, 森英喜, 尾方成信, 鉄中水素拡散における非線形ダイナミクス, 第5回非線形テクノサイエンス講演会, 2010.3.8, 大阪大学

(32) 竹中唯太, 君塚肇, 尾方成信, 格子欠陥-固溶物相互作用系の並列フェーズフィー

ルド解析, 日本機械学会関西学生会平成21年度学生員卒業研究発表講演会, 2010.3.15, 神戸大学

(33) 豊永翔, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信, 短距離分子動力学シミュレーションのGPUへの実装と評価, 日本機械学会関西学生会平成21年度学生員卒業研究発表講演会, 2010.3.15, 神戸大学

(34) 津曲達也, 脇園浩史, 君塚肇, 尾方成信, 反応性ボンドオーダーポテンシャルによるC60の重合プロセス解析, 日本機械学会関西学生会平成21年度学生員卒業研究発表講演会, 2010.3.15, 神戸大学

(35) 伊東勝道, 松野喬幸, 君塚肇, 尾方成信, 原子密度汎関数理論による二元系材料の解析, 日本機械学会関西学生会平成21年度学生員卒業研究発表講演会, 2010.3.15, 神戸大学

〔その他〕

ホームページ等

<http://tsme.me.es.osaka-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

君塚 肇 (KIMIZUKA HAJIME)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授
研究者番号: 60467511