

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27日現在

機関番号: 1 4 3 0 3 研究種目: 基盤研究(C) 研究期間: 2010~2012 課題番号: 22540419

研究課題名(和文) 大規模分子シミュレーションによる直鎖アルカン薄膜の表面融解・表面

固化機構の解明

研究課題名(英文) Clarification of the mechanisms of surface melting and surface

freezing in *n*-alkane thin films by large-scale molecular simulation

研究代表者

藤原 進 (FUJIWARA SUSUMU)

京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・准教授

研究者番号: 30280598

研究成果の概要(和文):直鎖アルカンは、バルク融点より数度高い温度域で、分子鎖が表面に対して垂直に単分子膜を形成するという特異な現象を示すことが知られている。この現象は、低分子系における表面融解と対照的な現象で、表面固化現象と呼ばれている。本研究では、分子動力学シミュレーションにより、nーノナンおよび nーノナデカン超薄膜の融解過程を調べた。その結果、nーノナンでは表面融解が起こるのに対して、nーノナデカンでは内部から融解し、表面固化状態が実現することが明らかになった。

研究成果の概要(英文): It is well known that n-alkanes exhibit surface freezing, where a solid monolayer forms at the surface of an isotropic liquid above its bulk melting temperature. This is a distinct contrast to a surface-melting phenomenon in the low-molecular substance. In this study, we investigated the melting processes of n-alkane thin films by molecular dynamics simulations. In the case of n-nonane, it is found that melting occurs from the surface, which indicates that n-nonane exhibits surface melting. In the case of n-nonadecane, on the other hand, we find a temperature range where the middle layer is in the molten states and both surface layers remain in the crystalline state (surface frozen state).

交付決定額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合 計
2010年度	1, 900, 000	570,000	2, 470, 000
2011年度	800, 000	240,000	1, 040, 000
2012年度	800, 000	240,000	1, 040, 000
年度			
年度			
総計	3, 500, 000	1, 050, 000	4, 550, 000

研究分野:ソフトマターの物理・計算物理

科研費の分科・細目:物理学・生物物理・化学物理

キーワード:(1) 高分子構造・物性(2) 表面・界面物性(3) 計算物理(4) 可視化

1. 研究開始当初の背景

1993 年に Wu 等により直鎖アルカンの表面 固化現象が発見されて以来、表面固化現象に 関する様々な実験及びシミュレーション研究がなされてきた。山本(山口大学)等は、直鎖アルカンのユナイティッド・アトムモデル

を用いて MD シミュレーションを行い、自由表面における表面固化現象の解析を行った。このシミュレーションでは、鎖長を変化させて調べていないため、直鎖アルカンの鎖長が表面融解・表面固化現象に及ぼす影響の系統的解析は行われていない。これまで我々は、

高分子の構造形成に関するシミュレーション研究を行ってきた。本研究では、これまでの研究を発展させ、直鎖アルカン薄膜の表面融解・表面固化機構を分子レベルで解明する。

2. 研究の目的

近年、有機 EL や有機太陽電池など、有機 薄膜材料を用いた電子・光デバイスの研究開 発が活発化している。そのため、高分子など の有機薄膜の物性が注目を集めている。一方、 有機材料の機能が構成分子の凝集構造に大 きく依存することを考えると、新機能を有す る有機ナノ材料を効率的に開発するには、基 本的な有機物質の融解・結晶化挙動を理解す る必要がある。そこで本研究では、分子シミ ュレーション手法を用いて、直鎖アルカン薄 膜の表面融解・表面固化機構を系統的に解明 する。具体的には、直鎖アルカン薄膜の自由 表面における表面融解・表面固化現象を系統 的に調べる。本研究により、有機薄膜材料の 基礎物性の理解に大きく貢献することがで きる。

3. 研究の方法

直鎖アルカン薄膜の表面融解・表面固化機構を系統的に解明するため、自由表面を持つ直鎖アルカン超薄膜の分子動力学 (MD) シミュレーションを行い、融解過程に対する鎖長および膜厚の影響を調べる。

直鎖アルカンの分子モデルとして、ユナイティッド・アトムモデルを採用する。粒子間の相互作用は、共有結合によるものと非共有結合によるものに分けられる。共有結合ポテンシャルとして、伸縮ポテンシャルとして、タブンシャルを考える。非共有結合ポテンシャルを考える。非共有結合ポテンシャルを考える。鎖長の異なる直鎖アルカンとして、nーノナンとnーノナデカンを用い、温度・圧力一定のMDシミュレーションを行う。

初期配置として、一層あたり 168 分子を 3 ~9 層並べた結晶を用意し、MD セルに納める。分子鎖軸方向(膜に対して垂直な方向)に二層分の厚さの真空領域を用意し、周期境界条件を適用する。系の温度を徐々に上げ、融点の特定および融解過程の解析を行う。

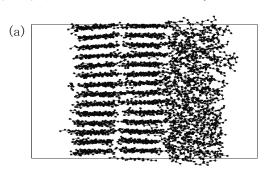
4. 研究成果

一次元密度プロファイルや各層における 二次元動径分布関数、配向秩序パラメータな どを詳細に解析することにより、以下の成果 が得られた。

(1) n-ノナンでは表面融解が起こるのに対して、n-ノナデカンでは内部から融解し、表面固化状態が実現することが明らかになった(図 1)。このような鎖長の違いによる

融解様式の違いは、実験結果と一致している。

- (2) 膜厚が変化しても融解様式は変化しないことから、分子鎖長が融解様式を決定する重要な因子であると結論づけることができる。
- (3) 表面固化状態では、分子鎖のトランス配 座の割合が高くパッキングが密な表面層を 持ち、内部層が融解することにより系全体が 安定化することが明らかになった。



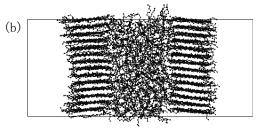


図 1. 融解中における直鎖アルカン薄膜のスナップショット。(a) n-ノナン、(b) n-ノナデカン。

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21件)

- 1. T. Tsuboi, M. Harada, K. Ishii, <u>S. Fujiwara</u> and T. Itoh, Nucleation and polymorphism of trans-1, 4-polyisoprene containing copper phthalocyanine, Polymer J., 查読有, 印刷中 DOI: 10.1038/pj.2013.3
- 2. K. M. Aoki, <u>S. Fujiwara</u>, K. Sogo, S. Ohnishi and T. Yamamoto, One-, Two-, and Three-Dimensional Hopping Dynamics, Crystals, 查読有, Vol. 3, No. 2, 2013, pp. 315-332

DOI: 10.3390/cryst3020315

3. H. Nakamura, N. Kashima, A. Takayama, K. Sawada, Y. Tamura, <u>S. Fujiwara</u> and S. Kubo, Optimization of a corrugated millimeter—wave waveguide and a miter bend by FDTD simulation, J. Phys.: Conf. Ser., 查読無, Vol.410, 2013,

- pp. 012046-1-012046-4 DOI: 10. 1088/1742-6596/410/1/012046
- 4. Y. Tamura, H. Nakamura, T. Okamura, N. Kashima, <u>S. Fujiwara</u> and S. Kubo, FDTD simulation of millimeter-wave corrugated waveguides with cylindrical symmetry model, J. Phys.: Conf. Ser., 查読無, Vol. 410, 2013, pp. 012029-1—012029-4

DOI: 10.1088/1742-6596/410/1/012029

- 5. <u>S. Fujiwara</u>, M. Hashimoto, T. Itoh and R. Horiuchi, Micellar Shape Change in Amphiphilic Solution: A Molecular Dynamics Study, Chem. Lett., 查読有, Vol. 41, No. 10, 2012, pp. 1038—1040 DOI: 10.1246/cl.2012.1038
- 6. <u>S. Fujiwara</u>, T. Itoh, M. Hashimoto, H. Nakamura, R. Horiuchi and Y. Tamura, Dynamic Coexistence of Micellar Shapes in Amphiphilic Solution: A Molecular Dynamics Study, Annual Report of National Institute for Fusion Science, 查読無, April 2011 March 2012, 2012, p. 381
 - http://www.nifs.ac.jp/report/annrep12
 /index.html
- 7. <u>S. Fujiwara</u>, R. Maruyama, T. Itoh, M. Hashimoto and R. Horiuchi, Molecular Dynamics Simulation for Melting Process of *n*-Nonadecane Ultrathin Films, Annual Report of National Institute for Fusion Science, 查読無, April 2011 March 2012, 2012, p. 383 http://www.nifs.ac.jp/report/annrep12

nttp.//www.nifs.ac.jp/report/annrep12
/index.html

- 8. <u>S. Fujiwara</u>, Molecular Simulation of Higher-Order Structure Formation by Amphiphilic Molecules, Activity Report 2011, Supercomputer Center, MDCL ISSP University of Tokyo, 查読無, 2012, p. 236
- 9. R. Shirasaki, Y. Yoshikai, H. Qian, <u>S. Fujiwara</u>, Y. Tamura and H. Nakamura, Dissipative particle dynamics simulation of phase behavior in bolaamphiphilic solution, Plasma Fusion Res., 查読有, Vol. 6, 2011, pp. 2401116-1-2401116-4 DOI: 10.1585/pfr. 6.2401116
- 10. Y. Tamura, K. Ukita, N. Mizuguchi and S. <u>Fujiwara</u>, Design Support System with Haptic Feedback and Real-Time Interference Function, Plasma Fusion Res.,查読有, Vol.6, 2011, pp. 2406061-1-2406061-5 DOI: 10.1585/pfr.6.2406061
- 11. S. Fujiwara, T. Itoh, M. Hashimoto, Y.

- Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, Molecular Dynamics Simulation of Micellar Shape Change in Amphiphilic Solution, Plasma Fusion Res., 查読有, Vol. 6, 2011, pp. 2401040-1-2401040-4 DOI: 10.1585/pfr.6.2401040
- 12. Y. Tamura, <u>S. Fujiwara</u>, T. Umetani and H. Nakamura, Bracelet shaped thermal display for representing numerical data, J. Electron. Mater., 查読有, Vol. 40, No. 5, 2011, pp. 823—829 DOI: 10.1007/s11664-011-1582-4

13. S. Fujiwara, T. Itoh, M. Hashimoto, H. Nakamura, R. Horiuchi and Y. Tamura, Molecular Dynamics Simulation of Micellar Shape Change in Amphiphilic Solution: Effect of Molecular Rigidity, Annual Report of National Institute for Fusion Science, 查読無, April 2010 - March 2011, 2011, p.389

http://www.nifs.ac.jp/report/annrep11/index.html

- 14. <u>S. Fujiwara</u>, R. Maruyama, T. Itoh, M. Hashimoto and R. Horiuchi, Molecular Dynamics Simulation of Melting Process in n-Nonane Ultrathin Films, Annual Report of National Institute for Fusion Science, 查読無, April 2010 March 2011, 2011, p. 390 http://www.nifs.ac.jp/report/annrep11/index.html
- 15. <u>S. Fujiwara</u>, Molecular Simulation of Higher-Order Structure Formation by Amphiphilic Molecules, Activity Report 2010, Supercomputer Center, MDCL ISSP University of Tokyo, 查読無, 2011, p. 203
- 16. <u>S. Fujiwara</u>, D. Funaoka, T. Itoh and M. Hashimoto, Molecular Dynamics Simulation for Phase Behavior of Amphiphilic Solution, Comput. Phys. Commun., 查読有, Vol. 182, No. 1, 2011, pp. 192—194
 - DOI: 10.1016/j.cpc.2010.07.013
- 17. H. Nakamura, A. Ito, S. Saito, Y. Tamura, S. Fujiwara, N. Ohno and S. Kajita, Comparison with Surfaces of Diamond and Graphite for Adsorption of Hydrogen Solution, Plasma Fusion Res., 查読有, Vol. 5, 2010, pp. S2072—1—S2072—4 DOI: 10.1585/pfr.5.S2072
- 18. Y. Tamura, <u>S. Fujiwara</u> and H. Nakamura, Haptization of molecular dynamics simulation with thermal display, Plasma Fusion Res., 查読有, Vol. 5, 2010, pp. S2107-1—S2107-4

DOI: 10.1585/pfr.5.S2107

- 19. <u>S. Fujiwara</u>, T. Itoh, M. Hashimoto, H. Nakamura and Y. Tamura, Effect of Molecular Rigidity on Micelle Formation in Amphiphilic Solution, Plasma Fusion Res., 查読有, Vol. 5, 2010, pp. S2114-1—S2114-4
 - DOI: 10.1585/pfr. 5.S2114
- 20. <u>S. Fujiwara</u>, T. Itoh, M. Hashimoto, H. Nakamura, R. Horiuchi and Y. Tamura, Molecular Dynamics Simulation of Micelle Formation in Amphiphilic solution: Effect of Molecular Rigidity, Annual Report of National Institute for Fusion Science, 查読無, April 2009 March 2010, 2010, p. 346 http://www.nifs.ac.jp/report/annrep10 /index.html
- 21. <u>S. Fujiwara</u>, Large-Scale Molecular Simulation of Higher-Order Structure Formation by Amphiphilic Molecules, Activity Report 2009, Supercomputer Center, MDCL ISSP University of Tokyo, 查読無, 2010, p.211

〔学会発表〕(計47件)

- 1. <u>S. Fujiwara</u>, Y. Kurosawa, T. Itoh, M. Hashimoto and K. Yoshikawa, Effect of Block Length Ratio on Folded Structures of a Single Flexible—Semiflexible Diblock Copolymer: A Brownian Dynamics Study, The 9th SPSJ International Polymer Conference (IPC2012), 2012 年12月13日,神戸国際会議場(兵庫県)
- 2. M. Hashimoto, <u>S. Fujiwara</u> and T. Itoh, Cavitation in the Static Melt of Polymers, The 9th SPSJ International Polymer Conference (IPC2012), 2012 年 12月13日,神戸国際会議場(兵庫県)
- 3. 數野 輝, 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, デンドリマー/線状高分子電解質複合体 化の分子動力学シミュレーション, 2012 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, 2012 年 11 月 21 日, 東 京工業大学(東京都)
- 4. 高橋 寿始, 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅 人, ルアルカン超薄膜の融解に関する分 子動力学シミュレーション, 2012 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, 2012 年 11 月 21 日, 東京工業 大学(東京都)
- 5. <u>S. Fujiwara</u>, M. Hashimoto, T. Itoh, H. Nakamura and Y. Tamura, Shape transition of micelles in amphiphilic solution: A molecular dynamics study, Conference on Computational Physics

- 2012 (CCP2012), 2012 年 10 月 17 日, ニチイ学館神戸ポートアイランドセンター (兵庫県)
- 6. 橋本 雅人,<u>藤原</u>進,伊藤 孝,高分子静 止融液中のキャビテーション,平成 24 年 度繊維学会秋季研究発表会,2012 年 9 月 26 日,福井大学(福井県)
- 7. 藤原進, 宮田匠, 伊藤孝, 橋本雅人, 双頭型両親媒性溶液の相挙動に関する分 子動力学シミュレーション, 第61回高分 子討論会, 2012年9月21日, 名古屋工業 大学(愛知県)
- 8. 浜口 勝成,橋本 雅人,藤原 進,伊藤 孝,高分子の融液結晶成長と記憶効果, 第61回高分子討論会,2012年9月19日, 名古屋工業大学(愛知県)
- 橋本 雅人,藤原進,伊藤孝,高分子静 止融液中でのキャビテーション,第61回 高分子討論会,2012年9月19日,名古屋 工業大学(愛知県)
- 10. 藤原 進, 両親媒性溶液中におけるミセル 形成及びミセル形状変化の分子動力学シ ミュレーション:分子の剛直性の効果, プ ラズマシミュレータシンポジウム 2012, 2012 年 9 月 11 日, 核融合科学研究所(岐 阜県)
- 11. Y. Tamura, H. Nakamura, T. Okamura, N. Kashima, <u>S. Fujiwara</u> and S. Kubo, FDTD simulation of millimeter-wave corrugated waveguides with cylindrical symmetry model, International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE), 2012年9月4日, Budapest (Hungary)
- 12. H. Nakamura, A. Takayama, K. Sawada, Y. Tamura, <u>S. Fujiwara</u> and S. Kubo, Optimization of a corrugated millimeter-wave waveguide with the Drude-Lorentz dielectric constant by FDTD simulation, International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE), 2012年9月6日, Budapest (Hungary)
- 13. 藤原 進, 橋本 雅人, 伊藤 孝, 両親媒性 溶液中におけるミセル形状変化の分子動 力学シミュレーション, 第61回高分子学 会年次大会, 2012年5月31日, パシフィ コ横浜(神奈川県)
- 14. 橋本 雅人, <u>藤原</u>進, 伊藤孝, 高分子静 止融液中でのキャビテーション, 第 61 回 高分子学会年次大会, 2012 年 5 月 31 日, パシフィコ横浜(神奈川県)
- 15. S. Fujiwara, M. Hashimoto, T. Itoh and R. Horiuchi, Micelle formation and micellar shape change in amphiphilic solution: A molecular dynamics study, International Association of Colloid

- and Interface Scientists (IACIS2012), 2012年5月17日,仙台国際センター(宮城県)
- 16. R. Shirasaki, H.-J. Qian, <u>S. Fujiwara</u> and H. Nakamura, Dissipative particle dynamics simulation of phase behavior and molecule bending in bolaamphiphilic solution, International Association of Colloid and Interface Scientists (IACIS2012), 2012 年 5 月 16 日, 仙台国際センター(宮城県)
- 17. 藤原 進, 高分子及び両親媒性分子の構造 形成に関するMDシミュレーション研究, ミニセミナー「極限環境下のソフトマテリ アル」, 2012 年 3 月 8 日, 海洋研究開発 機構 横浜研究所(神奈川県)
- 18. 藤原 進, 直鎖アルカンの構造形成および 融解過程の分子動力学シミュレーション, 北大-産総研包括連携等事業ワークショ ップ, 2012 年 1 月 19 日, 北海道大学 東 京オフィス(東京都)
- 19. 白崎 良演, フウジュン・ジャン, <u>藤原</u>進, 中村 浩章, 双頭型両親媒性高分子溶液の 相構造の散逸粒子動力学シミュレーション, 第25回分子シミュレーション討論会, 2011年12月5日, 東京工業大学(東京都)
- 20. H. Nakamura, K. Ukita, Y. Tamura, T. Okamura, S. Sawada, S. Fujiwara and S. Kubo, Finite-Difference Time-Domain Simulation on Millimeter-Wave Propagation in Corrugate Waveguide, 21st International Toki Conference on Integration of Fusion Science and Technology for Steady State Operation, 2011年11月28日,セラトピア土岐(岐阜県)
- 21. R. Shirasaki, H.-J. Qian, <u>S. Fujiwara</u> and H. Nakamura, Investigation of phase behavior of bolaamphiphilic solution using dissipative particle dynamics simulation, 30th JSST Annual Conference (JSST 2011) International Conference on Modeling and Simulation Technology, 2011年10月22日,東海大学 高輪キャンパス(東京都)
- 22. 黒澤 勇作,藤原進,伊藤孝,橋本雅人,吉川研一,単一屈曲―半屈曲ジブロックコポリマーの折り畳み転移に及ぼすブロック長比の効果:ブラウン動力学研究,「核融合科学研究所・共同研究(プラズマー壁相互作用シミュレーョン解析に関する研究会)」「自然科学研究機構・若手研究者による分野間連携プロジェクト(非平衡を制御する科学)」合同研究会,2011年9月29日,核融合科学研究所(岐阜県)
- 23. 宮田 匠, <u>藤原</u> 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, 双頭型両親媒性分子の相挙動:粗視化分子

- 動力学シミュレーション,「核融合科学研究所・共同研究(プラズマー壁相互作用シミュレーョン解析に関する研究会)」「自然科学研究機構・若手研究者による分野間連携プロジェクト(非平衡を制御する科学)」合同研究会,2011年9月29日,核融合科学研究所(岐阜県)
- 24. 橋本 雅人,<u>藤原進</u>,伊藤孝,高分子静 止融液下におけるキャビテーション,第 60回高分子討論会,2011年9月29日,岡 山大学(岡山県)
- 25. 黒澤 勇作,藤原進,伊藤孝,橋本雅人,吉川研一,単一屈曲-半屈曲ジブロックコポリマーの折り畳み転移に関するブラウン動力学研究,第60回高分子討論会、2011年9月28日、岡山大学(岡山県)
- 26. 宮田 匠,藤原 進,伊藤 孝,橋本 雅人, 双頭型両親媒性分子の相挙動に関する粗 視化分子動力学シミュレーション,第 60 回高分子討論会,2011年9月28日,岡山 大学(岡山県)
- 27. 藤原進,橋本雅人,伊藤孝,両親媒性 溶液中におけるミセル形成とミセル形状 変化の分子動力学シミュレーション,第 60回高分子討論会,2011年9月28日,岡 山大学(岡山県)
- 28. 中島 郭葵,橋本 雅人,藤原 進,伊藤 孝,無機非晶基盤上におけるフッ素系高 分子の結晶相転移異常,第60回高分子学 会年次大会,2011年5月27日,大阪国際 会議場(大阪府)
- 29. 橋本 雅人,藤原進,伊藤孝,高分子静止融液下におけるキャビテーション,第60回高分子学会年次大会,2011年5月26日,大阪国際会議場(大阪府)
- 30. 藤原進,橋本雅人,伊藤孝,両親媒性溶液中におけるミセル形状変化に及ぼす分子の剛直性の効果,第60回高分子学会年次大会,2011年5月26日,大阪国際会議場(大阪府)
- 31. <u>S. Fujiwara</u>, M. Hashimoto and T. Itoh, Molecular Dynamics Simulation of Micelle Formation in Amphiphilic Solution: Effect of Molecular Rigidity, The 2nd FAPS Polymer Congress, 2011年5月10日, Beijing (CHINA)
- 32. 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, 両親媒性 溶液中におけるミセル形成の分子動力学 シミュレーション:分子の剛直性の効果, 日本物理学会第66回年次大会, 2011年3月28日, 新潟大学(新潟県)
- 33. 黒澤 勇作, 藤原進, 伊藤孝, 橋本雅人, 吉川研一, 単一屈曲一半屈曲ジブロックコポリマー鎖の折り畳み転移に関するブラウン動力学シミュレーション, 2010年度第2回【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】, 2011年3月2日,

- 核融合科学研究所(岐阜県)
- 34. 宮田 匠,<u>藤原</u>進,伊藤孝,橋本雅人, 双頭型両親媒性分子の自己会合に関する 粗視化分子動力学シミュレーション, 2010 年度第 2 回【非線形問題の解法と可 視化に関する研究会】,2011年3月2日, 核融合科学研究所(岐阜県)
- 35. <u>S. Fujiwara</u>, T. Itoh, M. Hashimoto, Y. Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, Molecular dynamics simulation of micellar shape change in amphiphilic solution, 20th International Toki Conference on The Next Twenty Years in Plasma and Fusion Science, 2010 年 12 月 8 日, セラトピア土岐(岐阜県)
- 36. H. Nakamura, S. Yonemura, S. Saito, A. Ito, <u>S. Fujiwara</u> and A. Takayama, Hydrogen isotope irradiation on amorphous carbon, 20th International Toki Conference on The Next Twenty Years in Plasma and Fusion Science, 2010 年12月8日,セラトピア土岐(岐阜県)
- 37. R. Shirasaki, Y. Yoshikai, H.-J. Qian, S. Fujiwara, Y. Tamura and H. Nakamura, Dissipative particle dynamics simulation of phase behavior in bolaamphiphilic solution, 20th International Toki Conference on The Next Twenty Years in Plasma and Fusion Science, 2010 年 12 月 7 日, セラトピア 土岐(岐阜県)
- 38. K. Ukita, Y. Tamura, N. Mizuguchi and <u>S. Fujiwara</u>, Design Support System in an Immersive Projection Display with Haptic Feedback, 20th International Toki Conference on The Next Twenty Years in Plasma and Fusion Science, 2010 年12月7日,セラトピア土岐(岐阜県)
- 39. 橋本 雅人,<u>藤原進</u>,伊藤孝,高分子静 止融液下におけるキャビテーション,第 59回高分子討論会,2010年9月16日,北 海道大学(北海道)
- 40. 藤原 進, 橋本 雅人, 伊藤 孝, 高分子および両親媒性分子系における構造形成ダイナミクス, 第59回高分子討論会, 2010年9月15日, 北海道大学(北海道)
- 41. 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, 田村 祐一, 中村 浩章, ソフトマター系における 構造形成の分子動力学シミュレーション と可視化, 2010 年度第1回【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】, 2010年9月13日, 核融合科学研究所(岐阜県)
- 42. <u>S. Fujiwara</u>, Molecular Dynamics Simulation of Structure Formation in Polymeric and Amphiphilic Systems, One-Day International Symposium on Computer Simulation in Polymeric

- Systems, 2010 年 8 月 31 日, 京都工芸繊維大学(京都府)
- 43. <u>S. Fujiwara</u>, H. Iwashita, Y. Nishikawa, M. Hashimoto and T. Itoh, A New Identification Method of Various Mesophases in Amphiphilic Solution, International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter 2010, 2010 年 8 月 18 日,奈良県新公会堂(奈良県)
- 44. Y. Tamura, H. Nakamura and <u>S. Fujiwara</u>, Bracelet shaped thermal display for representing numerical data, The 29th International Conference on Thermoelectrics, 2010年6月1日, Shanghai (CHINA)
- 45. 土井 淳嗣, 橋本 雅人, <u>藤原 進</u>, 伊藤 孝, 静止 高分子融液中における Cavitation, 第59回高分子学会年次大会, 2010年5月28日, パシフィコ横浜(神奈 川県)
- 46. 寺内 俊二,橋本 雅人,藤原 進,伊藤 孝,イソタクチックーアタクチックポリスチレン混合物におけるシンジオタクチックポリスチレンの結晶多形,第59回高分子学会年次大会,2010年5月28日,パシフィコ横浜(神奈川県)
- 47. 藤原 進, 橋本 雅人, 伊藤 孝, 両親媒性 溶液中におけるミセル形成に及ぼす分子 の剛直性の効果, 第59回高分子学会年次 大会,2010年5月26日, パシフィコ横浜 (神奈川県)

[その他]

ホームページ等

http://www.cis.kit.ac.jp/~fujiwara/inde x-j.shtml

- 6. 研究組織
- (1)研究代表者

藤原 進 (FUJIWARA SUSUMU) 京都工芸繊維大学・工芸科学研究科・准教 揺

研究者番号:30280598

(2)研究分担者

. ()

研究者番号:

(3)連携研究者

()

研究者番号: