

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 1 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2011～2014

課題番号：23686032

研究課題名(和文)局所破断面のイオン流動に関する量子・分子動力学法の展開

研究課題名(英文)Quantum molecular dynamics study on ion flow phenomena at locally broken surfaces

研究代表者

土井 謙太郎 (DOI, KENTARO)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：20378798

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 17,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、量子・分子流体科学の分野において独創技術の提案と基礎研究を行った。一つに、局所破断面に見られる微細流路に生じるイオンと分子の流動現象の計測と理論的検証を行った。局所的にイオンが遍在することが実現されれば、2 V程度の印加電圧で生じる弱い電場でも電気流体力学的流れが生成することが見出された。一方、化学反応系に見られる分子運動に伴う電荷移動の効果を分子流体力学に考慮するため、分子軌道に基づく電子波動関数の時間発展を試み、計算効率の改善について考察した。さらに、対称性を考慮することによるBurnsideの補題に基づいた状態数の数え上げに着目し、量子分子動力学法への適用を検討した。

研究成果の概要(英文)：In this study, fundamental research works were performed in the field of quantum molecular science, suggesting some novel techniques. It was found that in a confined liquid phase, where an ion concentration could be highly polarized, electrohydrodynamic flows were induced by a low applied voltage of about 2 V. This new finding is expected to open the door to expand the application of electrokinetics. We discussed the improvement of molecular flow dynamics to treat charge transport phenomena according to molecular dynamics in chemical reaction systems. A novel time expansion method of molecular orbitals was suggested as an alternation of conventional ab initio methods. Furthermore, an efficient method was discussed, focusing on a procedure to count up possible states in symmetric systems based on Burnside's lemma.

研究分野：量子分子動力学

キーワード：分子流体力学 マイクロ・ナノデバイス 数値解析

1. 研究開始当初の背景

イオンや分子流動を利導した先進的新技術が様々な分野で目覚ましく発展してきている。たとえば、リチウムイオン二次電池、低コスト触媒開発、ドラッグデリバリーやコンピュータ創薬などが挙げられる。しかしながら、その学術体系に関しては、連続体理論と離散力学系理論が混在し、かつ化学反応を扱うためには量子力学が必要となり、複雑な流体现象を扱う上での統一的な理論体系が確立されているとは言えない。そのため、表面・界面のような電気二重層が存在し、電荷移動を伴うような化学反応系の包摂は困難を極めている。さらなる分子流体科学の発展には、量子力学を取り入れ、かつ、従来の連続体理論に接続可能な新しい力学理論の構築が不可欠で、より本質的なモデリングと定式化が必須の課題と言える。研究代表者らの先行研究において、電子・イオン・原子の集団的な振る舞いを分子流体力学の枠組みで捉えるための基礎研究を行ってきている。主に、溶媒中における DNA の流動現象と電氣的応答性、燃料電池やリチウムイオン二次電池におけるイオン流動現象を解明し、さらには応用技術への展開を目的とした研究に従事してきた。これまでの経験に基づき、電子、イオン、分子と流体の相互作用系における現象の実験的解明と新規理論の構築による課題の解決が求められている。

2. 研究の目的

当初、本計画では、上述の学術背景にある問題を克服するために、次の3課題に取り組むことを目標とした：

- (1) 微細流路の局所破壊効果による分子流動場の定量的評価
- (2) 量子力学と分子動力学のカップリングシミュレーションによる電子状態の精密予測と高速化技法
- (3) 生体高分子等の大規模系を対象とした、非定常 Schrödinger 方程式における電子積分の高効率化に関する数学的研究

課題(1)は、微細流路の局所破断面によるイオン・分子流動評価法の確立であり、破断されたイオン交換膜における局所的なイオン流動の観察を試みる。これは、電氣的中性条件の破れを検知するためのアイデアである。粒子個々の運動を観察することは困難であるため、イオンの集団的な振る舞いを溶媒の流動として観測し、定量的に評価することが目的である。たとえば、破断された陽イオン交換膜を用いる場合は、陰イオンの集中する微細流路が形成されることで誘起される流動現象を可視化および電氣計測により局所的な電氣的中性条件の破れを明らかにする。課題(2)では、電子と分子運動の特性時間の差異に着目した量子分子動力学(QMD)法の開発に挑戦し、これまでに取り組んできた QMD 法についてさらなる展開を試みる。本課題では、原子核の運動に伴う電

子波動関数の時間発展を同時に解くための解法を提案し、電荷移動の本質を詳細に解明する。課題(3)では、電荷移動を伴う化学反応系を対象とした量子力学計算における電子波動関数の相互作用積分の軽減を目的とし、従来法に制限されることなくさまざまな基底関数形を対象に対称性を考慮することによる求積法の開発に挑戦する。

本研究課題は、上述の3課題から構成され、それぞれに研究代表者独自の多角的なアプローチが提案されている。その主旨は、マルチスケールの流体现象を統一的に理解するための基礎理論の展開にあり、そのために巨視的観点から定義される電氣的中性条件の破たんを確かめることと、ミクロスケールの流動現象を分子動力学(MD)的に扱うことにある。電解質溶液におけるイオン輸送現象をより深く理解するために、局所的なイオン流動場を実験的に捉えること、またそれを解析するための理論的手法を構築する。本来、イオン選択性を示すイオン交換膜をあえて破壊することにより、そこに見られる特異な流れに注目する試みは独創的な手段である。さらに、ミクロスケールの流動現象に潜む電荷移動現象を考慮するために QMD 法を用いることは挑戦的な課題であるが、その成果は、コンピュータ創薬や触媒開発への応用へと発展が期待できる。

3. 研究の方法

課題(1)として挙げた、局所破断面における分子流動の定量的評価を行うために、流れの可視化と電氣計測を行う。まず、電解質溶液で満たされた液相を、あらかじめ微小な孔を設けたイオン交換膜で区切る。両液相にはイオン電流を流すための電極を挿入しておく。電解質溶液には、陽イオンと陰イオンが含まれるが、イオン交換膜にはイオン選択性があるため、正負いずれかの電荷を支配的に通す。一方、イオン交換膜を通過するイオンのカウンターイオンは膜に設けられた孔に集中して通過することにより、正負イオンの流れが整流されることが期待される。このようなイオン輸送現象を確かめるために、孔中に一方のイオンを集中させ、それに引きずられて動く溶媒の流動を可視化する。ポリスチレン微粒子をトレーサ粒子として、溶液に分散させ、その流動をハイスピードマイクロスコープで観察する。それを実現するための実験系を図1に模式的に示す[9]。電解質溶液

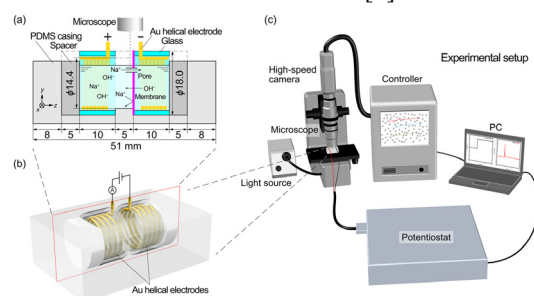


図1. 課題(1)の実験系模式図[9].

には塩化ナトリウムや塩化カリウムの水溶液が考えられるが、塩は電極反応を伴わないため定常的な電流は得られず、流れの可視化には適さない場合も想定される。その場合は、塩酸や水酸化ナトリウム等の酸・アルカリにより電極反応を介して、定常電流が得られる場を生成する。また、膜の大きさとそこに設ける孔の面積比についても最適な比率を見出す必要がある。

課題(2)および(3)では、分子やイオンの関与する流動現象における電荷移動を考慮したMD法を開発する。原子スケールの表面・界面現象を扱うためには、化学反応や電荷移動を考慮したMD解析が必要となるが、大規模系への適用は十分にはなされていない。電子の運動を量子力学の意味で考慮するとき、一般に分子の運動に対して電子の時間スケールが短いことと電子状態計算に膨大な時間を要することから、MD計算における律速要因となる。電子の振る舞いが引き金になるとしても、結局のところ原子・分子が寄与する流動現象を捉えたいとなると、電子のために要する計算時間を極力短縮したい。そのために、電子の時間発展にかかる時間を短縮するか、または時間ステップにおける電子状態計算を短縮することが必要となる。本課題では、各時刻で電子の基底状態を計算しながら原子のダイナミクスを解析する従来の*ab initio* MD法の抱える課題[3]を克服することを目標に、新しい計算法を提案する。

具体的に、電荷移動を考慮したMD法を確立する上での課題とされる電子状態計算にかかる時間の短縮について検討する。従来法では、各時刻で基底状態の計算を行う必要があるため、膨大な計算時間を要することが問題点であったが、ここでは、参照する始状態と終状態間では、基底状態の計算を介さずに時間発展のSchrödinger方程式に従って波動関数の遷移を計算することを提案する。反復を必要とする基底状態計算に比べて、直接に時間発展を追うことにより計算効率の向上が望める[10]。しかしながら、計算の安定性については不明な点が多く、十分な考察が必要となる。

また、状態間の遷移については、電子の外場に対する応答特性が重要な指標となることが考えられることから、たとえば、電流電圧特性を調べることにより電子の外場に対する振る舞いを知る手段についても提案する。簡潔には、Heisenbergの不確定性原理に基づき、電流とエネルギーの関係を導出し、外部より印加される電場に対する応答を双極子の変化によるものと考えるとき、量子力学の意味で、分子を介した電流電圧特性が解析される。詳細は、本研究の成果として出版された文献に示されている[4]。

4. 研究成果

(1) 微細流路の局所破壊効果による分子流動場の定量的評価

ここでは、膜厚が約220 μm の陰イオン交換膜に1 mm \times 1 mmの矩形断面を持つポリジメチルシロキサン(PDMS)により作製された流路を貫通させて局所破断面とした。この流路の長さは約3 mmであり、上方よりハイスピードマイクロスコープで流路の中心面458 μm \times 611 μm (幅 \times 長さ)の視野で粒子を追跡した。この微小孔で溶媒が駆動される原理として、複数の現象が連成すると考えられ、それを理論的に予測した。化学平衡にある初期状態において、電解質溶液には正負両電荷のイオンが同数個存在することによって電気的中性条件が保たれているが、電極に電圧が印加されると液中の各イオンが電極の電場に引かれるために分離される。しかしながら、バルクの溶液では、電極近傍にだけ強い電場が生じ、液中はおおよそ電気的中性が保たれると考えられる。そのため、正負イオンの偏りはほとんど無いと言ってよい。このような条件下では、両符号のイオンがそれぞれ溶媒である水分子を引きずるために溶媒の流動は引き起こされないと考えられる。一方で、陰イオン交換膜に孔が存在する場合には、膜面は陰イオンが選択的に通過し、孔中は正負両イオンが通過する。しかしながら、電場が印加されることによりイオンの輸送が生じ、陰イオンの流れに対向する陽イオンの流れも生じるが、陰イオンは全面を通過することに対して、陽イオンの移動は孔に限られるために、孔中は陽イオンが集中した場が形成されると予想される。このような場合、孔内部における陽イオンの移動が溶媒の流動を引き起こすと予想される。流体力学の視点から、溶液の誘電率は一定としてNavier-Stokes方程式の外力項に電荷密度と電場の積が加味された場合を考える。溶液中の電荷密度と静電ポテンシャルの関係はPoisson方程式で、さらにイオン輸送についてはNernst-Planck方程式で記述されることが知られている。本研究では、別途、外部より印加される電場に対するイオンの応答特性をNernst-Planck-Poisson方程式により解析することを試みている[7]。電極間のイオン輸送現象は、電場を印加した直後に電極表面が瞬時に遮蔽され、それに続く緩やかな拡散現象により安定したイオン分布が形成される。このとき、電極近傍では正負イオンの分極が見られるが、離れた位置ではおおよそ正負イオンが電気的中性を保っていることが確かめられた。また、電極間距離と安定な拡散層が形成されるまでの緩和時間の関係が示された。この結果を基に、拡散層が形成されるまでの時間にイオンの動きがあるものと考えられ、イオン輸送に伴う溶媒の流動が誘起される。電極間の電流応答とイオン交換膜の孔に見られる流動を同時に観察した。電極の電流応答波形には、電極近傍のイオンが電極に引かれるときの電流の立ち上がりが見られた後に、イオンの拡散により電流が減衰し、電極反応が伴う場合には定常電流が残る。本研究

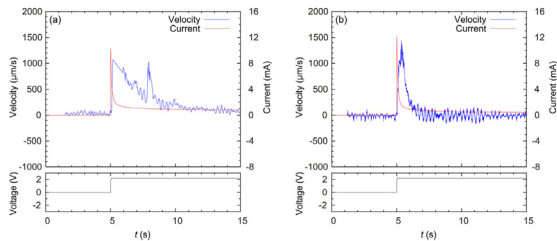


図 2. 局所破断面を通過する溶媒の速度応答[9].

では、0.1 mol/L の NaOH 溶液を用いて両電極間に 2.2 V の電位差を与えていることから、電極では水の電気分解のために定常電流が得られる。実験結果より得られる電流応答波形から現象に含まれる時定数を推定し、それを用いて非定常な電気的外力が電解質溶液に印加された場合の溶媒の流動を解析した。溶媒の流動とイオン輸送の時定数の比は、動粘度と拡散係数の比で与えられる。本研究の場合は、溶媒の時定数のほうが圧倒的に小さいことから、電流波形に見られる時定数はイオン輸送によるものと考えられる。実験結果を図 2 に示す。これより、電圧印加直後に電流信号が立ち上がり、それに続いて流体の速度応答が開始している。この結果から、電場が印加された直後に、電極近傍のイオンが電極に引かれ、液中の拡散に伴って孔内部のイオンが溶媒を引きずって流動を引き起こしている。電流の立ち上がりと溶媒の速度応答に時間のずれが見られているところは、イオン輸送現象が空間的な広がりを持っていることを示している。このことは、先の理論モデルから定性的に説明される。図 3 は、実験結果の電流応答を指数関数の重ね合わせでフィッティングし、その応答を外力として溶媒の流れを解析したものである。これより、流体の速度応答は電流の発生に遅れて立ち上がっていることが分かる。さらに、電場の向きを連続的に逆転させた場合の流体の応答についても、実験・理論の双方で確認された。このことから、陰イオン交換膜に設けられた微細な孔には、陽イオンが集中して通過するためにそれに引きずられて溶媒の流れが生じることが確認された。つまり、局所的に電気的中性条件の破れた濃度場を形成することは可能であり、さらに正負電荷の偏りにより流動場が生成されることが明らかとなった。原理的には、陽イオン交換膜に設けられた孔には陰イオンが集中した流れが生成されることから、電荷の正負を問わず流れが形成されることがわかる。ここでは、非定常の過渡的な応答を調べるにとどまった

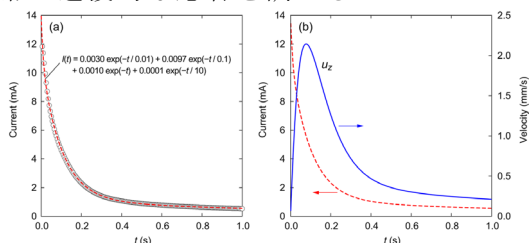


図 3. 電流応答と溶媒の速度応答の解析結果[9].

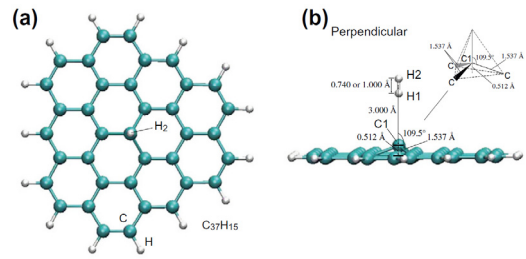


図 4. グラフェン表面近傍の水素分子[3].

が、今後の発展として、定常的な流れを生成することによる工学的応用が期待される。

(2) 量子力学と分子動力学のカップリングシミュレーションによる電子状態の精密予測と高速化技法

本課題ではまず、化学反応を伴う MD 手法の構築を行い、従来法との差異を述べる。図 4 に示すように、グラフェンを切り出したモデルの上に水素分子を衝突させた場合の解離吸着過程について *ab initio* MD 計算を行った[3]。初期条件として、固定されたグラフェン表面に対する水素分子の配置と表面に向かう入射エネルギーを与えた。初期配置として、水素分子の軸がグラフェン表面に対して垂直および平行となる 2 通りを考慮した。グラフェンの表面構造として、先行研究において平坦な表面では水素分子の解離が生じなかったため、部分的な立体構造を取るモデルを提案した。このような立体構造の存在は実験的にも確認されている[3]。図 5 に示すように、水素分子がグラフェン表面に対して垂直に配置している場合、入射エネルギーとして 8.0 eV の運動エネルギーを持って衝突した場合に、水素分子の結合が開裂して一方の水素原子がグラフェンの立体構造に吸着し、他方の水素原子が解離した。一方、水素分子がグラフェン表面に対して平行に配置している場合は、6.0 eV の入射エネルギーで解離吸着が確認された。初期の状態では、水素原子間の結合が伸縮振動している場合ほど低い入射エネルギーで解離吸着が生じることが示唆された。さらに、解離吸着過程における水素原子の変位と電荷移動の関係が明らかにされた。これより、水素分子がグラフェンの吸着点に接近するにつれて、グラフェンの炭素原子と水素原子間に電荷移動が生じ、そのために水素原子間に電子が過剰な状態がとなって斥力が作用して結合の開裂が起こることが示された。その後、解離する水素原子

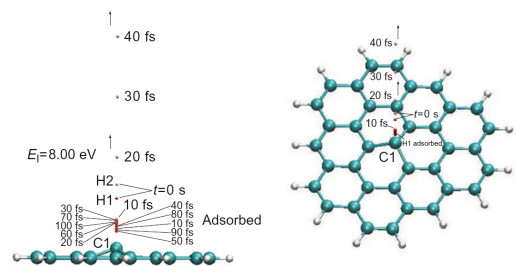


図 5. 水素分子の解離吸着 (Ab initio MD) [3].

は電氣的に中性の状態に脱離する。一方の吸着する水素原子は、炭素原子と電荷を交換しながら伸縮振動する。この一連の素過程は、*ab initio* MD を用いることで可能となるものであり、従来の電荷移動を考慮しない MD 法では再現することができない。しかしながら、*ab initio* MD 法では、解析できる時空間スケールが限られ、大規模系に適用するには現実的では無い。そこで、ボトルネックである基底状態計算にかかるコストを最小限に抑えながら電荷移動の効果を効率よく考慮した手法を検討した。Newton 力学の意味での MD 解析は、初期条件さえ与えれば、その先の時間発展を計算でき、任意時刻の粒子の運動を解析できることが利点の一つである。一方、化学反応の意味では、反応物（始状態）と生成物（終状態）が既知であるとき、その間の反応経路を探索することが目的となる。本研究では、まず、既知の二状態間の運動経路を解析するための手段について考える。反応物としての基底状態を始状態とし、生成物側へ向かって構造が変化するとき、時間発展 Schrödinger 方程式に従って、電子波動関数の振る舞いについて計算した。このとき、原子配置の時間変化について、反応物と生成物の内分点から近似的に構造を導出し、各時刻における静電ポテンシャルとして展開した。ポテンシャル場の変化に伴って、電子波動関数も反応物から生成物へ向かって変化することが確かめられた[10]。逆に、生成物を始状態として反応物側へ時間変化する様子も確かめられた。一方、一電子に対する Schrödinger 方程式には、散逸項が含まれていないため、終状態へ至ったときには励起状態にあり、基底状態とは異なる電子波動関数が得られる。電荷移動について、*ab initio* MD 解析の結果と比較しても、各時刻で基底状態にある場合とは異なる結果が得られた。現実には、多くの場合、熱平衡状態において基底状態にあることから、散逸過程の考慮が必要と考えられる。今後の発展として、詳細には電子状態から力の計算を行って Newton の運動方程式を解くことで原子の運動を計算し、電子波動関数の運動と連立することで複合ダイナミクスが実現される。

(3) 生体高分子等の大規模系を対象とした、非定常 Schrödinger 方程式における電子積分の高効率化に関する数学的研究

QMD 法におけるもう一つの改善点として、電子積分にかかる計算コストの削減が挙げられる。電子の存在には不確実性があり、識別不可能性のために交換相互作用が働く。そのために Schrödinger 方程式は非線形となり、自己無撞着場として基底状態の近似解を得ている。このとき、電子間の相互作用積分に膨大な労力を費やすことになるため、大規模分子系を対象とする場合には、このような積分計算に対する効率化が求められる。積分そのものの数値計算法については、既にいくつ

かの方法が知られている。ここでは、分子構造を統計的に扱う際に必要となる状態の数え上げに着目し、対称性が課された場合に重複なく考え得る構造のすべてを見出す手段について検討した[1]。たとえば、円を二等分し、各半円を4色で塗り分ける場合の組み合わせを考える。円には対称性があるため、2回回転対称性の下で塗り分けを考えると、円を単色で塗りつづす場合が4通り、2色で塗り分ける場合が6通りとなる。ここで、2色で塗り分ける場合は、180度回転したときと同じ塗り方になるものは同一と考える。分子構造の場合は、対称性による重複をエネルギーで評価することができる。このように、対称性の下で重複の無いすべての場合の数を数え上げる方法として、Burnside の補題が知られており、これを分子構造に適用することにより、複雑な高分子構造であっても状態を評価することが可能となる。本研究では、炭化水素系の高分子膜として知られる sulfonated poly(ether ether ketone) (SPEEK) を対象としてその凝集構造を評価した。単量体に官能基であるスルホン酸基を1個含むものとする、4種類の独立な単量体構造が考えられる。二次元平面上でこれらの分子が配置したときの最近接二分子間の相互作用エネルギーをあらかじめ計算しておき、それを3×3の周期構造に拡張したときの全エネルギーを計算した。このとき、 D_{3h} の対称性を考慮して Burnside の補題より、重複の無いすべての分子構造を数え上げた。エネルギー計算の結果は、分子力学計算の結果とよく一致し、SPEEK 分子の凝集構造における分布が明らかにされ、構造の安定性を議論することが可能となった。本解析手法は、無作為に構造を選び出して分子力学計算を繰り返すことに比べて、必要最小限の計算コストで分子構造を解析することを可能とした[1]。ここでは、ある対称性の下で分子の状態数を網羅するために上述の手法を適用したが、電子状態解析において、電子の分布に対称性の縛りを課すと同様の議論が展開されると考えられる。本研究期間では、具体的に電子状態解析における積分計算への展開は未完結の課題として残されたが、およそその戦略は示された。今後は、電子状態に対して Burnside の補題を適用することにより Schrödinger 方程式の新解法への発展が期待される。

その他、本研究課題を遂行するに当たり、副次的に得られた成果について述べる。電極間に捕捉された金属粒子や DNA の塩基分子の電気伝導性に関する解析手法の提案と電流電圧特性の評価を行い、実験結果に対してよい一致を得た[2]。溶液中で帯電した生体高分子の自己集合化に関して反応拡散モデルを提案し、50塩基対 poly(dA)·poly(dT) DNA 断片の自己集合化過程について検討した[6]。二次元平面上に形成される自己集合化構造の時空間スケールについて実験結果を説明

した。また、DNA断片の粗視化モデルを構築しMD解析を用いることにより、微視的スケールの自己集合化現象を再現することに成功した[5]。外部電場が印加された電解質溶液中におけるDNA分子の電気泳動現象について粗視化モデルを用いた実スケールシミュレーションを行い、実験結果と良い一致を示した[8]。以上のように、本研究課題において、溶液中におけるイオンや帯電した分子の輸送現象に関する基礎研究の進展があり、国内外から評価を得ている。また、電子が関与する流動現象に関して、量子力学を考慮した新手法を提案し、非平衡状態における物理化学現象の定量的評価を可能とした。

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 16 件)

- [1] K. Doi, K. Kato, and S. Kawano, Characterization of Polymer Structures based on Burnside's Lemma, *Physical Review E*, Vol. 84 (2011), pp. (011805-1)-(011805-8).
- [2] K. Doi, Y. Nishioka, and S. Kawano, Theoretical Study of Electric Current in DNA Base Molecules Trapped between Nanogap Electrodes, *Computational and Theoretical Chemistry*, Vol. 999 (2012), pp. 203-214.
- [3] K. Doi, I. Onishi, and S. Kawano, Dissociative Adsorption of H₂ Molecules on Steric Graphene Surface: Ab Initio MD Study based on DFT, *Computational and Theoretical Chemistry*, Vol. 994 (2012), pp. 54-64.
- [4] P. Szarek, S. Suwannawong, K. Doi, and S. Kawano, Theoretical Study on Physicochemical Aspects of Single Molecular Junction: Application to the Bases of ssDNA, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 117(2013), pp. 10809-10817.
- [5] K. Doi, H. Takeuchi, R. Nii, S. Akamatsu, T. Kakizaki, and S. Kawano, Self-Assembly of 50 bp poly(dA) · poly(dT) DNA on Highly Oriented Pyrolytic Graphite via Atomic Force Microscopy Observation and Molecular Dynamics Simulation, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 139 (2013), pp. (085102-1)-(085102-9).
- [6] K. Doi, Y. Toyokita, S. Akamatsu, and S. Kawano, Reaction-Diffusion Wave Model for Self-Assembled Network Formation of Poly(dA)·Poly(dT) DNA on Mica and HOPG Surfaces, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, Vol. 17 (2014), pp. 661-677.
- [7] K. Doi, M. Tsutsui, T. Ohshiro, C.-C. Chien, M. Zwolak, M. Taniguchi, T. Kawai, S. Kawano, and M. Di Ventra, Nonequilibrium Ionic Response of Biased Mechanically Controllable Break Junction (MCBJ) Electrodes, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 118 (2014), pp.

3758-3765.

- [8] W. Qian, K. Doi, S. Uehara, K. Morita, and S. Kawano, Theoretical Study of the Transpore Velocity Control of Single-Stranded DNA, *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 15 (2014), pp. 13817-13832.
- [9] K. Doi, A. Yano, and S. Kawano, Electrohydrodynamic Flow through a 1 mm² Cross-Section Pore Placed in an Ion-Exchange Membrane, *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 119 (2015), pp. 228-237.

他 7 件

[学会発表] (計 29 件)

- [10] K. Doi and S. Kawano, Theoretical Development of Predicted Iteration Method for Considering Electron Dynamics in Quantum Molecular Dynamics, *Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011*, Hamamatsu, Japan, July (2011), pp. (36033-1)-(36033-3).
- [11] K. Doi, M. Tsutsui, T. Ohshiro, M. Taniguchi, T. Kawai, M. Di Ventra, and S. Kawano, Theoretical Study of Nonequilibrium Ion Transport near Biased Electrode, *Book of Abstracts of the fourth TSME International Conference on Mechanical Engineering*, Pattara, Chonburi, Thailand, October (2013), p. 81 and CST1014 (6pages) in CD-ROM.
- [12] K. Doi, M. Tsutsui, T. Ohshiro, M. Taniguchi, T. Kawai, M. Di Ventra, and S. Kawano, Theoretical Study of Non-Equilibrium Ionic Response near Electrode Surface, *IFMBE Proceedings, The 15th International Conference on Biomedical Engineering*, Singapore, December 4th - 7th (2013), pp. 108-111.
- [13] 矢野絢子, 土井謙太郎, 川野聡恭, 電解質溶液における非定常イオン流の可視化, 日本機械学会 2014 年度年次大会講演論文集 DVD-ROM, p.J0550302, 東京電機大学, 2014 年 9 月.
- [14] 土井謙太郎, 川野聡恭, 基板表面の影響を受ける自己集合化パターン形成の反応拡散モデル, 日本機械学会 第 92 期 流体工学部門講演会, USB, 1311, 富山大学, 2014 年 10 月.

他 24 件

[その他]

ホームページ等

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

6. 研究組織

(1) 研究代表者

土井謙太郎 (DOI KENTARO)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号 : 20378798