

研究課題別評価

1 研究課題名:

量子分子動力学法に基づく化学反応型連成現象シミュレータの開発

2 研究者氏名: 久保百司

3 研究のねらい:

半導体・エレクトロニクス分野の製造プロセス設計、材料設計において、化学反応、摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、電場などが複雑に絡み合った連成現象の理解が重要課題となっている。従来、連成現象の理論的検討には有限要素法などが活用されてきた。しかし、「化学反応」の解明には量子論的アプローチが必須であり、従来法の発展だけでは「化学反応を伴う連成現象の解明」というブレイクスルーを成し遂げることはできない。そこで、本研究では研究者が開発してきた SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法と非平衡分子動力学法を統合化することで、量子論的に「化学反応ダイナミクス」を扱いながら、「摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、電場」との連成現象を解明可能な化学反応型連成現象シミュレータを世界に先駆けて開発することを目的とした。これにより、化学機械研磨プロセス、エッチングプロセス、化学気相堆積プロセスなど化学反応を伴う連成現象の量子論的解明を可能とし、従来は不可能であった新しい製造プロセス設計、材料設計を実現させる。

4 研究成果:

(1) 化学反応を伴う連成現象シミュレータの開発 (図 1)

①「摩擦場と化学反応」の連成現象シミュレータの開発

Si 半導体の超平坦化技術として重要な化学機械研磨プロセスにおける「摩擦場と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には、砥粒に対して基板方向に一定の圧力をかけ、さらに砥粒を基板に平行に一定速度で移動させるアルゴリズムを導入することで上記プログラムを開発した。

②「衝撃と化学反応」の連成現象シミュレータの開発

Si 半導体の微細加工技術として重要なエッチングプロセスにおける「衝撃と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には、一定のエネルギーを持ったエッチャント分子を基板に照射するアルゴリズムを導入することで、上記プログラムを開発した。また、Si 半導体の微細形成技術として重要な化学気相堆積プロセスにおける「衝撃と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムも開発した。特に堆積過程に伴う粒子数の増減を扱う必要があるため、計算ステップ毎にハミルトニアン行列、重なり積分行列等のサイズを可変にすることで、粒子数の増減が可能なプログラムを開発した。さらに、Si 半導体のドーピング技術として重要なインプラネーションプロセスにおける「衝撃と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には、様々なエネルギーを持ったドーパントを、様々な初期配置、傾斜角、回転角で基板に照射するアルゴリズムを導入することで上記プログラムを開発した。

③「流体と化学反応」の連成現象シミュレータの開発

Si 半導体の化学機械研磨プロセスにおいて、摩擦場によって溶液が「流れ」を形成するとともに、この流体が摩擦

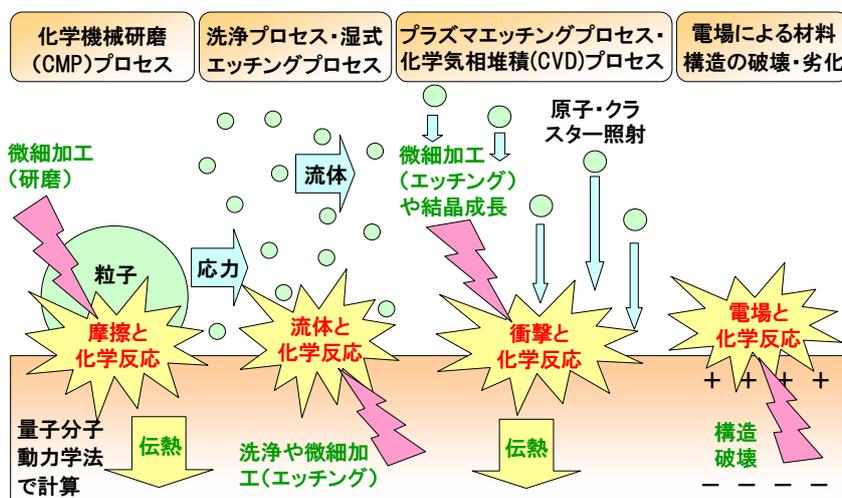


図 1 開発した量子分子動力学法に基づく化学反応型連成現象シミュレータの模式図

場における化学反応に影響を与える「流体と化学反応と摩擦場」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。さらに、バイオ分野における生体膜透過プロセスを解明するために、ポテンシャル勾配の存在によって流れ場が存在する系において、「流体と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。

④「電場と化学反応」の連成現象シミュレータの開発

電場下におけるプラズマディスプレイ材料の耐久性評価を行うために、「電場と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には、量子分子動力学計算のハミルトニアンに電場の項を導入することで、上記プログラムを開発した。

⑤「光と化学反応」の連成現象シミュレータの開発

申請時の研究計画にはなかったが、光による振動励起によって化学反応を誘発させるプロセスをシミュレーションするために、「光と化学反応」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には、赤外光照射のエネルギーに相当する速度を分子の振動方向に与えることが可能なアルゴリズムを導入することで、上記プログラムを開発した。

⑥「電場と化学反応と電子輸送」の連成現象シミュレータの開発

申請時の研究計画にはなかったが、絶縁体が電場により化学反応を含む構造破壊を起こし、それに伴い電気伝導度が増加する絶縁破壊現象を解明するために、「電場と化学反応と電子輸送」の連成現象を解明可能な量子分子動力学計算プログラムを開発した。具体的には量子分子動力学法に基づく電気伝導度シミュレータを開発し、さらに電場下での電気伝導度変化を計算可能なアルゴリズムを導入することで上記プログラムを開発した。

⑦「電子輸送と伝熱」の連成現象シミュレータの開発

申請時の計画にはなかったが、電子伝導に伴う熱伝導度を予測可能な「電子輸送と伝熱」の連成現象シミュレータを開発した。具体的には、量子分子動力学法に基づく電気伝導度シミュレータを用いて得られた電気伝導度から、Wiedemann-Franz 則により電子伝導に伴う熱伝導度を予測可能な方法論を開発した。

(2) 大規模計算を可能とする高速計算プログラムの開発

①部分対角化法に基づく高速計算プログラムの開発(図2)

電子密度変化の激しいフェルミ準位近傍の分子軌道のみを毎ステップ精密に対角化し、それ以外の軌道を粗視化することで高速計算を実現する部分対角化法を開発した。特に、時間経過に伴い、化学反応に関与するフェルミ準位近傍の分子軌道数が増えるため、対角化を行う行列の大きさが可変なプログラムを作成した。本手法により、以前の SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に比較して、25 倍以上の高速化に成功した。これは、従来の第一原理分子動力学法と比較すると 10 万倍以上の高速化を実現したことを意味する。

②動的ハイブリッド法に基づく高速計算プログラムの開発

化学反応が起こるサイトを量子分子動力学法で、それ以外の部分を古典分子動力学法で計算を行う動的ハイブリッド法を開発した。特に、化学反応の進行に伴い時々刻々と変化する化学反応サイトに追従して、量子論で扱う領域を変化させることで、大規模系における連成現象に対応した高速化を実現したことが特徴である。また、量子論で扱う領域の末端を水素原子ではなくイオン化ポテンシャルなどのパラメータを操作した仮想的原子で終端することで、高精度計算を実現した。

(3) 複雑な連成現象の視覚化を可能とする 3 次元グラフィックインターフェイスの開発

開発済みの古典分子動力学用 3 次元グラフィックインターフェイスを基本に、分子軌道の描画機能、原子の電荷の表示機能、軌跡の描画機能、動画の作成機能を追加することで、複雑な連成現象の視覚化を可能とする 3 次元グラフィックインターフェイスを開発した。

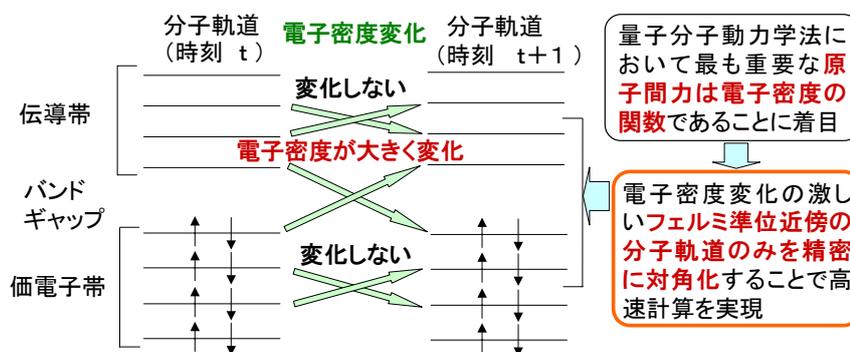


図2 開発した部分対角化法の模式図

(4) 開発シミュレータの連成現象解明への応用と製造プロセス設計・材料設計の実現

① Cu 表面の化学機械研磨プロセスの解明

開発した「摩擦場と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、酸化された Cu(111)面のアルミナ砥粒による化学機械研磨プロセスシミュレーションを実現した。その結果、摩擦によって Cu 原子が結合生成と結合解離を繰り返す化学反応ダイナミクス、Cu 原子の脱離ダイナミクスを明らかにした。

② Si酸化膜表面のCeO₂砥粒による化学機械研磨プロセスの解明と砥粒の理論設計

開発した「摩擦場と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、Si酸化膜表面のCeO₂砥粒による化学機械研磨プロセスのシミュレーションを実現した。摩擦化学反応によるSi酸化膜内の結合の切断、CeO₂砥粒内の結合の切断、Si酸化膜-CeO₂砥粒間の結合生成ダイナミクスを明らかにした(図 3)。さらに、ZrO₂砥粒を用いた場合との違いについて検討し、CeO₂砥粒の場合にはCeO₂砥粒とSi酸化膜の間に化学反応が起こるのに対し、ZrO₂砥粒の場合にはZrO₂砥粒とSi酸化膜の間に化学反応が起こらず、機械的研磨のみが起こることを明らかにした。これは、Ceは3価と4価の電子状態を取りうるため界面で酸化還元反応が起こりやすいのに対し、Zrは2種類の酸化状態を取らないため化学反応が起こりにくいことが原因であることも明らかにした。これら結果より、機械的研磨しか起こさないZrO₂砥粒よりも、化学反応と機械的研磨の連成現象を起こすCeO₂砥粒の方が、表面平坦化に適していることが予測された。さらに、開発した「摩擦場と化学反応と流体」の連成現象シミュレータを活用し、ZrO₂砥粒とSi酸化膜の間に多数の水分子を配置した系について化学機械研磨シミュレーションを行った。その結果、水分子が摩擦場において「流れ場」を形成し、この流体がSi酸化膜表面で解離反応を起こす連成現象を明らかにした。

③ シリコン酸化膜表面のエッチングプロセスの解明

開発した「衝撃と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、Si酸化膜表面のCF₂分子によるエッチングプロセスのシミュレーションを実現した。図 4(a)にシミュレーションモデルを、図 4(b)、(c)にCF₂分子の照射エネルギーが5eV、10eVの場合の結果を示す。図より照射エネルギーが5eVと小さい場合にはCF₂分子が表面で反射されるのに対し、

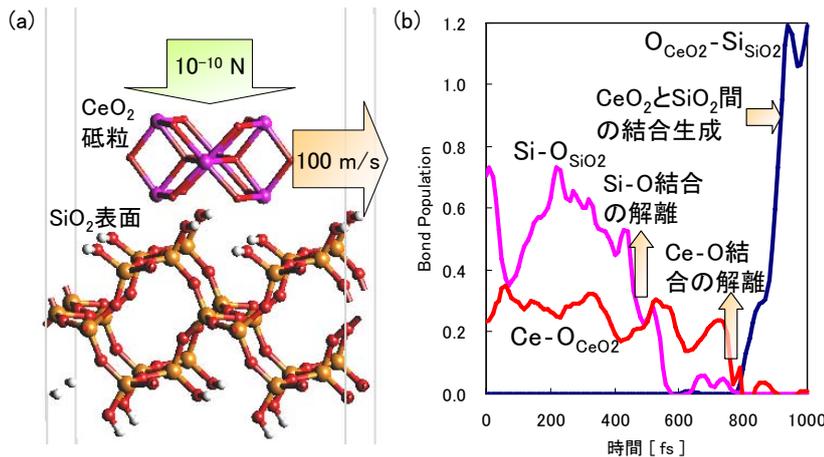


図 3 (a)CeO₂砥粒によるSiO₂表面の化学機械研磨プロセスシミュレーションのモデル図と (b)シミュレーションによって得られた2原子間の Bond Population 変化

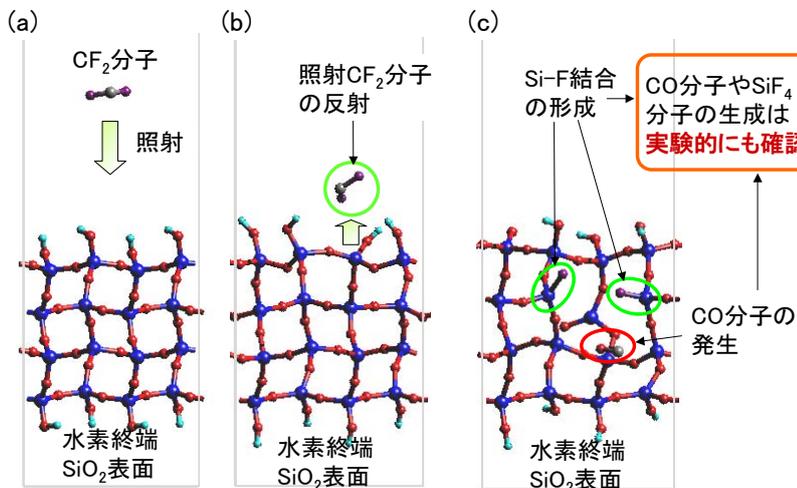


図 4 (a)CF₂分子によるSiO₂表面のエッチングプロセスのシミュレーションモデル、(b)CF₂分子を5eVで照射した場合のシミュレーション結果、(c)CF₂分子を10eVで照射した場合のシミュレーション結果

照射エネルギーが 10eVと高い場合にはCF₂分子が化学反応を起こし、CO分子を生成する化学反応ダイナミクスが解明された。実験的にもエッチングによりCO分子の生成が確認されており、開発シミュレータの有効性が示された。

④酸化物基板上での結晶成長プロセスの解明

開発した「衝撃と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、MgO(001)面上での MgO 薄膜の成長プロセスシミュレーションを実現した。その結果、MgO 薄膜が2次元のエピタキシャル成長をする様子が明らかにされた。実験的にもMgO(001)面上においてMgO 薄膜は(001)配向で、Layer-by-Layer 成長することが明らかにされており、計算結果は実験結果とよく一致する。一方、同じくMgO(001)面上にPd 原子を析出させたところ、3次元的な粒子成長によってPd 微粒子が形成される様子が明らかにされた。実験的にも、MgO(001)面上においてPd は粒子状の成長をすることが明らかにされており、これらの成果は開発シミュレータの有効性を示すものである。

⑤シリコン表面へのBF₂インプラネーションプロセスの解明

次世代半導体デバイスの創製には極浅ドーピングの実現が必須である。本課題においては、Bが結晶軸方向に拡散し、深い位置に到達するチャネリングが問題点である。この問題の解決には、Bよりも重いBF₂分子の照射が期待されている。そこで、「衝撃と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、Si(001)面へのBF₂のインプラネーションシミュレーションを行った(図5)。その結果、BF₂は60ステップで解離反応を起こし、BF₂照射によってもBドーピングが実現できることが示された。またB照射の場合に比べ、より浅い位置へのドーピングが実現できることも明らかにされた。

⑥シリコン表面への極浅ドーピング実現のためのアモルファス化プロセスの解明

前述の極浅ドーピングを実現する手法の第2案として、Si表面のアモルファス化後にBのインプラネーションを行い、その後Si表面の再結晶化を行うプロセスが注目されている。そこで、Si(001)面へのGe照射によるアモルファス化、その後のBインプラネーションについて検討を行った(図6)。その結果、Si表面のアモルファス化によりB原子の極

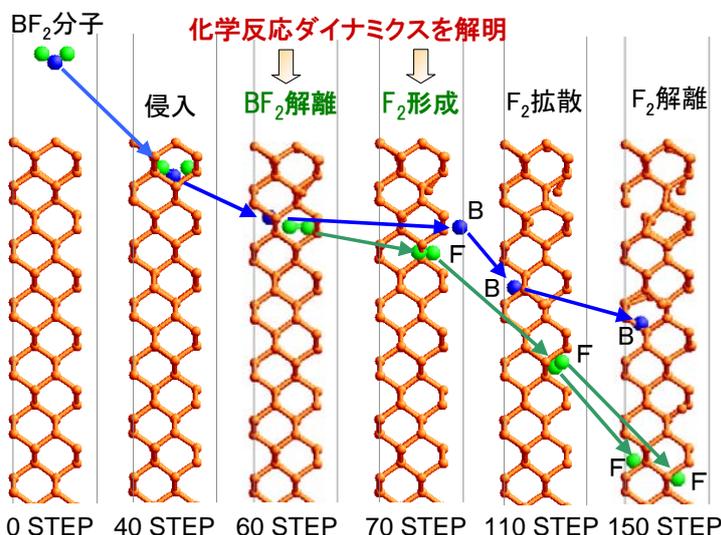


図5 Si(001)面へのBF₂分子のインプラネーションシミュレーション結果

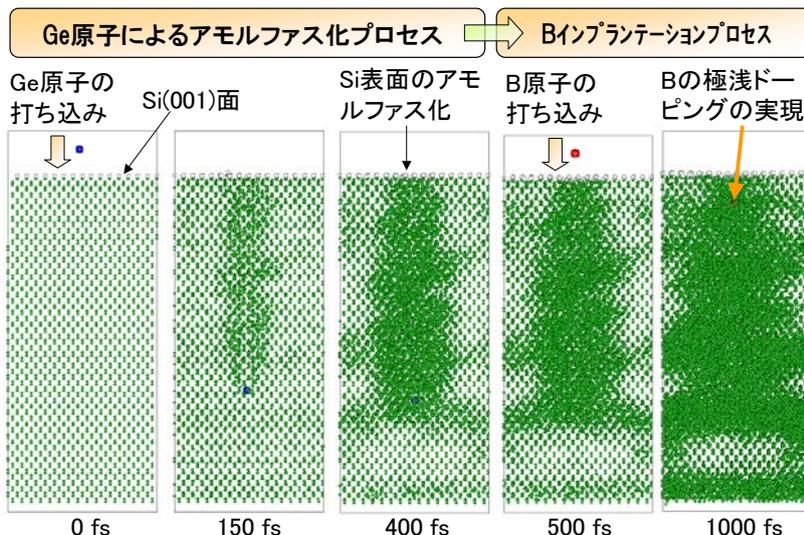


図6 Si(001)面へのGe照射によるアモルファス化プロセスとその後のBインプラネーションプロセスのシミュレーション結果

浅ドーピングを実現できることが示された。またこの結果は、開発した連成現象シミュレータの発展により、一連の半導体プロセスを連続的にシミュレーション可能な半導体プロセスシミュレータを開発できることを示している。

⑦Si(001)面におけるB原子の off-axis インプランテーションプロセスの理論設計

前述の極浅ドーピングを実現する手法の第3案として、B原子の off-axis インプランテーションが期待されている。そこで、様々な初期位置からB打ち込みの傾斜角、回転角を変化させて合計734回ものシミュレーションを行い、最適打ち込み角の設計を行った。その結果、表1に示すように傾斜角7度、回転角45度の時に最も浅い位置にドーピングを行えることを予測した。最適傾斜角が7度という結果は以前の実験結果に一致するとともに、実験的には明らかにされていない回転角の最適化を実現した。さらに、動的ハイブリッド法の導入により300Åもの深さを有する大規模モデルのシミュレーションを実現した(図7)。この成果は、開発シミュレータが実際の半導体プロセスと同じスケールで議論できる手法であることを意味する。

⑧Si表面における「光と化学反応」の連成現象プロセスの解明

クリーンかつ無害な次世代エネルギーとして水素が注目されている。この水素を効率的に製造する方法として、著者らはSi表面上で低エネルギーの赤外光を用いた水の光分解が有効であることを理論的に予測した。図8には、Si表面上に多数のH₂O分子を配置し、その後366KにおいてSi表面に近い水分子を3125cm⁻¹(37.38kJ/mol)の光で振動励起させた結果を示す。その結果、振動励起された水分子が解離反応を起こし、新しいSi-H、Si-O結合を生成する化学反応ダイナミクスが明らかにされた。一方、振動励起を行わない場合には、化学反応は全く観察されなかった。さらに、673Kでは水分子の振動励起によりH₂分子の発生が確認された。これら結果は、Si表面を用いることで、通常使用されている紫外光や可視光などの大きなエネルギーではなく、37.38kJ/molという小さなエネルギーで水分子から水素を発生できる可能性を示すものである。

表1 Si(001)面へのB原子の off-axis インプランテーションにおける入射角度の違いによるB原子の反射確率、平均最終到達深さ、標準偏差

傾斜角	回転角	反射確率	平均最終到達深さ	標準偏差
0°	-	56.9%	9.34 Å	4.75 Å
7°	0°	52.0%	8.72 Å	5.17 Å
7°	45°	52.0%	8.66 Å	4.53 Å
22.5°	0°	41.1%	10.65 Å	5.23 Å
22.5°	45°	38.8%	9.91 Å	4.64 Å
45°	0°	43.9%	12.61 Å	5.81 Å
45°	45°	53.1%	10.11 Å	5.43 Å

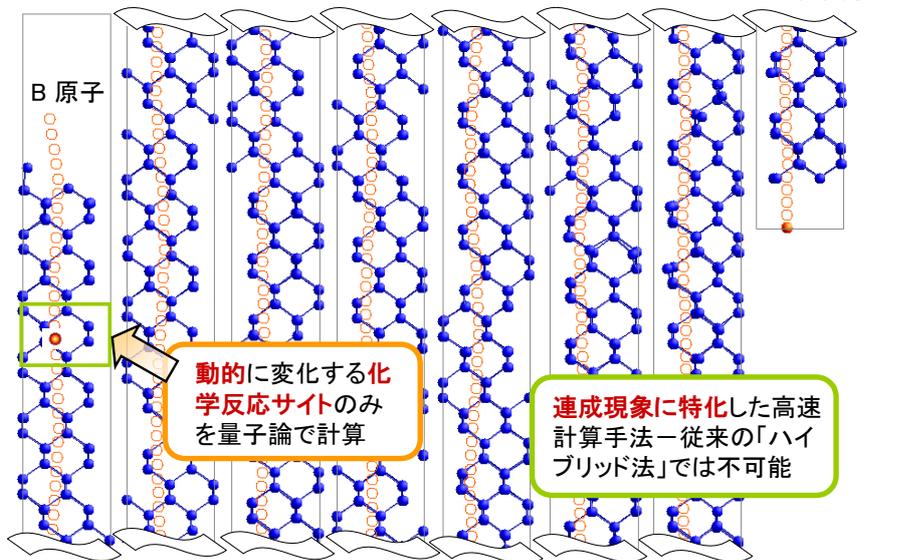


図7 動的ハイブリッド法を活用した深さ300Åの大規模Si(001)モデルにおけるBインプランテーション

⑨「流体と化学反応」の連成現象シミュレータのバイオ系への応用展開

多くの薬物はその標的タンパク質に結合するために生体膜を透過する。そこで、血糖降下剤であるグリクラジド分子の脂質二分子膜透過プロセスを、開発した「流体と化学反応」の連成現象シミュレータを用いて検討した。グリクラジド分子はケミカルポテンシャル勾配に従って膜内に侵入することから、この現象をモデル化するためにグリクラジド分子に応力を加えた。その結果、グリクラジド分子が水中から親水領域、疎水領域へと進むにつれ、各原子の電荷が0に近づき、グリクラジド分子内部の極性が減少することがわかった。このような電子移動ダイナミクスを生体膜透過プロセスで計算した例はなく、「流体と化学反応」の連成現象シミュレータが半導体プロセスに加え、バイオ系にも有効な方法論であることが示された。

⑩プラズマディスプレイの長寿命化を実現する新規 MgO 保護膜の材料設計と製造プロセス設計

プラズマディスプレイは高精細、薄型、大画面を実現可能であるが、液晶ディスプレイの2~3分の1の寿命しか持たず、長寿命化が焦点となっている。そこで、プラズマ下での電場によるMgO保護膜の構造破壊プロセスを検討するために、開発した「電場と化学反応」の連成現象シミュレータを活用し、MgO保護膜の電場下での構造破壊ダイナミクスを検討した。MgO(001)面、(011)面、(111)面について電場下での安定性を比較したところ、MgO(111)面が最安定であることが明らかにされた。さらに構造破壊過程において、MgO(111)面では[001]ファセットで囲まれた(111)配向のナドット構造が形成されること、このナドット構造の形成によりMgO(111)面の耐電場性が向上することを明らかにした。また、結晶成長シミュレーションにより α -Al₂O₃(0001)面を基板とすることで、上記の[001]ファセットで囲まれたナドット構造を有するMgO(111)面を作成できることも予測した。

⑪シリコン酸化膜における絶縁破壊現象の解明

開発した「電場と化学反応と電子輸送」の連成現象シミュレータを活用し、アモルファスSiO₂の電気伝導度が電場の増加とともに上昇する絶縁破壊現象を再現した。まず開発した電気伝導度シミュレータの妥当性について様々な材料系について検討した。ここで、本手法は電気伝導度の相対値を求める手法であるため、Siの実験値を基準として他の材料の電気伝導度を求めた。その結果、実験値を定量的に再現する結果を得た(表 2)。次に、アモルファスSiO₂に1~6 V/Åの電場をかけて構造破壊ダイナミクスの計算を行い、得られた構造に対して電気伝導度を求めたところ、電場の増加による電気伝導度の上昇が観察された。特に、構造破壊に伴うバンドギャップの減少とキャリア数の増加が

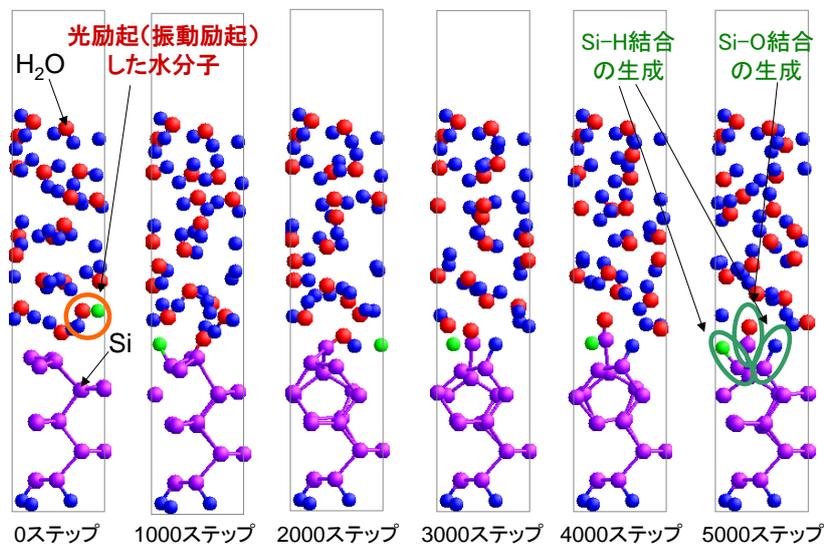


図 8 Si 表面上の水分子を赤外励起した場合の化学反応ダイナミクス(366K)

表 2 電気伝導度の計算結果と実験結果の比較

	計算値 (Scm ⁻¹)	実験値 (Scm ⁻¹)
Sn	1.6 × 10 ⁵	0.9 × 10 ⁵
Ti	2.9 × 10 ⁴	2.4 × 10 ⁴
Ge	1.9 × 10 ⁻²	1.9 × 10 ⁻²
Si	4.3 × 10 ⁻⁶	4.3 × 10 ⁻⁶
C _{Graphite}	0.7 × 10 ⁵	~10 ⁵

絶縁破壊現象の重要な因子であることが示された。

⑫伝導電子に基づく熱伝導度の予測

開発した「電子輸送と伝熱」の連成現象シミュレータを活用して、電子伝導に伴う熱伝導が顕著な系の熱伝導度を予測することに成功した。具体的には、Tiの熱伝導度に関して検討したところ、フォノン振動による熱伝導度に比較して、電子伝導による熱伝導度が10倍以上大きいことを明らかにした。さらに、得られた熱伝導度 $21\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ は実験結果 $22\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ をよく再現した。これら結果は、従来の古典分子動力学法に基づくフォノン振動の評価のみでは正確な熱伝導度が得られず、開発した「電子輸送と伝熱」の連成現象シミュレータにより、従来は不可能であった伝導電子による熱伝導特性の理論的予測が実現できるようになったことを示すものである。

5 自己評価:

当初の目標は、著者らが開発した SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法と非平衡分子動力学法を統合化することで、量子論的に「化学反応ダイナミクス」を扱いながら、「摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、電場」との連成現象を解明可能な化学反応対応型連成現象シミュレータを開発することであった。これに対し、着実に「摩擦場と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「流体と化学反応」、「電場と化学反応」の連成現象シミュレータを開発することに成功した。また、図1に示すようにこれらシミュレータには「応力」と「伝熱」の影響も含まれており、当初の計画通りの連成現象シミュレータを開発することに成功した。さらに、大規模計算を可能とするための高速計算手法として、部分対角化法と動的ハイブリッド法を当初の計画通り開発し、第一原理分子動力学法に比較して10万倍以上の高速化を実現した。特に、数百Åスケールの大規模モデルのシミュレーションを実現したことは、実際の半導体プロセスと同じスケールで議論ができることを意味し、量子論に基づくプロセス設計にとって大きな成果である。

また、開発した連成現象シミュレータの応用としては、化学機械研磨、エッチング、インプラントーション、結晶成長など当初の想定をはるかに超える12課題に対して、開発シミュレータの有効性を示すことができた。特に、Si半導体へのBインプラントーション、プラズマディスプレイ用MgO保護膜について、本研究により新たなプロセス、材料を提言できたことは、開発したシミュレータが企業の開発現場においても有効に活用可能であることを示すものである。

さらに当初の研究計画に加え、「光と化学反応」、「電場と化学反応と電子輸送」、「電子輸送と伝熱」の連成現象シミュレータを開発することにも成功し、非常に広範な連成現象への適用を実現した。また、応用面でも当初の目標であった半導体・エレクトロニクス分野のみならず、バイオ分野への適用も実現し、開発シミュレータが様々な研究分野に応用可能であることを示すことができた。

本研究により、「大規模計算」と「高精度計算」を2本の座標軸として発展してきた量子化学に対して、「マルチフィジックス現象の量子論」という新たな3本目の座標軸を開拓することができたのではないかと自負している。特に、従来は材料設計を主な目的としてきた量子化学に対して、プロセス設計が量子化学によって可能であることを示すことができた意義は大きいと考える。今後は、本研究をさらに発展させることで、量子論に基づき材料設計、プロセス設計、さらにはデバイス設計を可能とするデジタルエンジニアリング技術の確立を目指したいと考えている。

6 研究総括の見解:

世界に先んじた次世代IT技術を創造するためには、超高機能、超高速デバイスの創製を可能とする新しい基盤技術の確立が求められている。特に、超微細化が急速に進む半導体製造プロセスでは、原子レベルでの化学反応の制御が必須とされている。

久保研究者は独自に考案した SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法と非平衡分子動力学法を統合化することで、量子論的に「化学反応ダイナミクス」を扱いながら、摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、電場との連成現象を解明可能な化学反応対応型連成現象シミュレータを開発することに成功した。本研究成果のシミュレータを用いることにより、数百原子からなる大規模系において量子論に基づくマルチフィジックス現象のシミュレーションが可能となったことを高く評価する。

本シミュレータは市販化の対応も行っており、材料設計を主な目的としてきた従来の量子化学に対して、量子論によりプロセス設計が可能であることが新たに示された。量子論に基づき非経験的に材料設計、プロセス設計、デバイス設計の全てを可能とするデジタルエンジニアリング技術の確立に向けて大きな第一歩が踏み出されたものとする。

7 主な論文等:

論文(51件)

1. P. Selvam, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, and A. Miyamoto, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method: A Novel Approach to the Understanding and Design of New Materials and Catalysts, *Catal. Today*, 100 (2005) 11-25 (100号記念招待論文).
2. A. Rajendran, Y. Takahashi, M. Koyama, M. Kubo, and A. Miyamoto, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular

Dynamics Simulation of Mechano-Chemical Reactions during Chemical Mechanical Polishing Process of SiO₂ Surface by CeO₂ Particle, **Appl. Surf. Sci.**, 244 (2005) 34–38.

3. H. Tsuboi, A. Sagawa, H. Iga, K. Sasata, T. Masuda, M. Koyama, M. Kubo, E. Broclawik, H. Yabuhara, and A. Miyamoto, Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Depth Profile Prediction in Low Energy Boron Implantation Process, **Jpn. J. Appl. Phys.**, 44 (2005) 2288–2293.
4. T. Masuda, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, M. Kubo, E. Broclawik, and A. Miyamoto, Development of Hybrid Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Boron Implantation into Preamorphized Silicon Substrate, **Jpn. J. Appl. Phys.**, 45 (2006) 2970–2974.
5. M. Koyama, J. Hayakawa, T. Onodera, K. Ito, H. Tsuboi, A. Endou, M. Kubo, C. A. Del Carpio, and A. Miyamoto, Tribochemical Reaction Dynamics of Phosphoric Ester Lubricant Additive by Using a Hybrid Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method, **J. Phys. Chem. B**, 110 (2006) 17507–17511.

受賞(3件)

1. 久保百司、平成15年度石油学会奨励賞(旭化成ケミカルズ賞)、コンビナトリアル計算化学システムの開発とその触媒設計への応用、石油学会、2004年5月19日
2. 久保百司、平成16年度触媒学会奨励賞、触媒設計のための計算化学プログラムの開発、触媒学会、2005年3月30日
3. 久保百司、平成18年度科学技術分野の文部科学大臣表彰(若手科学者賞)、計算科学分野におけるマルチフィジックスシミュレータの研究、文部科学大臣、2006年4月18日

招待講演(国際会議14件(うち海外9件)、国内学会22件)

1. M. Kubo, Combinatorial Large-Scale Simulation for Catalysts and Materials Design, 2003 Materials Research Society Fall Meeting, **Boston, USA**, December 1–5, 2003.
2. M. Kubo, Computational Combinatorial Chemistry, Second Gordon Conference on Combinatorial & High Throughput Materials Science, **Santa Barbara, USA**, January 25–30, 2004.
3. M. Kubo, Theoretical High-Throughput Screening for Materials and Catalysts Design: Quantum Chemical Molecular Dynamics and First-Principles Approach, The 19th CODATA International Conference; Satellite Symposium for Materials Informatics and Its Evolution, **Berlin, Germany**, November 7, 2004.
4. M. Kubo, Integrated Computational Chemistry Approach to Tribology and Tribochemistry, *Frontiers in Boundary Lubrication*, **Lyon, France**, April 9–14, 2006.
5. M. Kubo, Multi-Physics SCF-Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for Catalyst and Process Design, 11th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, **Berlin, Germany**, June 11–14, 2006.

新聞発表等(1件)

1. 久保百司、東北大、理論計算でPDPを長寿命化できる蛍光体の保護膜を設計、日経ナノテクノロジー、2005年6月10日