

## 進化する社会と学問：触媒・コンピュータ化学研究の50余年を通して

東北大学未来科学技術共同研究センター  
宮本 明

### 1. はじめに

5年前に触媒学会シニア懇談会に入会させて頂くとともに、「触媒学会・触媒研究の思い出」という題で寄稿させて頂いた[1]。それから4年余、改めて寄稿の機会を与えて頂き、感謝いたします。昭和22年(1947年)5月3日の日本国憲法施行日の生まれであるので、執筆時点で、憲法と同じ、74歳となる。

人類の歴史を振り返ると、打製石器、磨製石器から最近の自動車、コンピュータ、ロボット、人工知能など様々な新しい道具が生まれ、社会を革新してきた。ただ、第二次世界大戦後の貧しい時代に生まれた時に、SDGs、地球温暖化、電気自動車、コンピュータ、人工知能などを想像できたであろうか。数十年という一人の人生の間にも、大きな社会の進化が起こる。ここでは、自分が生きた時代での研究を進化する社会と学問の観点で振り返ってみたい[2-4]。なお、この間、多くの先生方、共同研究者、学生の皆様とのオリジナル論文に加え、多彩な分野での総説も書く機会を頂いたので、感謝の気持ちも込めてそれらの総説を中心に引用させて頂く。多彩な分野での意義が分かり易

く書かれ、またオリジナル論文も引用されているので、ご参照頂ければ幸いです。

### 2. 触媒研究で体験した「進化する社会と学問」[5-8]

第二次世界大戦後のベビーブーム(団塊)世代であるので、憲法だけでなく、様々な面で新しい制度とともに歩んだ。中学卒業後に5年間学んだ国立鈴鹿工業高等専門学校もその一つであった。5年間の一貫教育で、大学の工学部卒業レベルに到達させるべく、先生方もとても意欲的で、数学、英語、ドイツ語、化学、物理、卒業研究などの教育を受けたことは振り返ってみると貴重な体験であった。

鈴鹿高専での学習を通して、もっと深く勉強してみたいという気持ちをもっていた時に、東北大学工学部が編入生を受け入れるという情報を得て、5年生の1月の編入学試験を受け、高専から編入学1期生として東北大学工学部3年生で学ぶ機会を得た。当時は何処の大学でも学園紛争が盛んで、東北大学でも3年生の前期には、かなりの時間がストライキ、学生討論などが行われ、大学に来たことを実感することになった。

その中で語られる様々な内容に興味をもち、歴史、経済、心理学、哲学、数学、量子力学、相対性理論など社会の基礎、科学の基礎をもっと深く勉強する機会を得たことは幸せなことであった。研究室配属は、高専での経験もあり、触媒を専門とされる荻野研究室を志望した。「液体金属の触媒作用」という全く新しい研究テーマを頂き、主体的に、研究手法、解析手法、実験装置の製作を行い、金属系、物理系、東工大、北大、名大などの研究者、学生と交流した。下宿近くのキャンパスには、大型計算機センターが開設、FORTRANプログラムによる反応器の流体力学的解析、量子化学的解析も進めた。研究にとって必要となる様々な基礎と主体的に学問を進める楽しさを習得する時代であった。

1975年4月、名古屋大学工学部合成化学科村上研究室の助手となった。日本国憲法施行の日に生まれたことにより、当時の考えが朝日新聞記事（1997年5月2日：施行日生まれの50歳にきく）になっているので、それを引用する。「東北大の博士課程を終えて1975年に名古屋大の助手になった。教授から与えられたテーマは、火力発電所から出る有害物質を取り除く研究だった。光化学スモッグや四日市ぜんそくなど公害が社会問題になっていた時代でも、モノ作りに直接結びつかない環境保護のために研究は傍流だった。それを生涯のテーマにしていけるかどうか。迷った時、憲法の施行日に生まれた偶然を意識した。平和憲法の理念を技術に生かすのが自分の使命と考え、迷いが吹っ切れた。」このようにして始めた環境触媒研究であるが、その成果が一連の論文として発表される頃になると、

世界的な注目を集め、アメリカ、ヨーロッパの多くの大学、研究所に招待され講演を行い、夕食会などにも招かれた。日本を先頭に世界的に環境触媒の重要性が急速に高まったお蔭であるが、社会と学問の関係、進化を深く考える貴重な機会となった。

### 3. コンピュータ化学研究で体験した「進化する社会と学問」[9-160]

1985年5月には、京都大学工学部石油化学科乾研究室に助教授として着任した。石油化学科教授を務められた福井謙一先生がノーベル賞を受賞された直後であったので、その時の興奮と高揚が強く残っていた。石油化学教室レベルでは、乾先生を中心とする概算要求が行われた。理論研究と実験研究の協奏効果を発揮させるための研究設備の要求であり、私は世話役を務めた。種々の構造解析装置に分子設計システムを加えた設備要求であるが、高く評価され、実現することになった。実験装置については、担当者が直ぐに決まったが、分子設計システムは希望も無く私が担当することになった。名大時代の成功体験だけでなく、要求書を纏める過程で、コンピュータ化学に大きな可能性を感じ取ることが出来たので、積極的に取り組むことにした。これについても成果を発表する頃になると早速、大きな反響を得ることが出来た。なお、この頃は、日本経済の影響力が最も大きかった頃で、世界全体のGDPの十数%を日本が占める時代であり、それを背景に学問の世界でも影響力が大きかった。

コンピュータ化学に対する大きな期待もあり、1992年4月からは東北大学工学部分子化学工学科教授となった。学科名、講

座名は変わっているが、学生時代の荻野研の後継である。新しい講座ではないので、コンピュータ化学に必要な設備購入費はなかった。多額の借金をして最低限の設備を整え、新しい研究室をスタートした。「新しい研究室をつくる：研究室の運営はこんなにたいへん」化学、48, 240 (1993)などでも紹介頂き、それに応えて、若手教員、学生も大活躍、多くの産学官のリーダーのご支援を得ながら大きな研究室を構築することが出来た。外国人教員の採用による学生、若手教員の国際化、多数の研究員、技術補佐員、プログラマーの雇用、国内外の多様な企業との産学連携、国内外の大学との連携による人材育成と基礎研究の推進など、大学研究室としての新しい取り組みも進めた。2002年には産学連携拠点して期待の高まっていた未来科学技術共同研究センター (NICHe) の専任教授になり、国内外からの注目も高まった。その結果、科研費など基礎研究だけでなく、多くの産学連携の大型プロジェクトにも選ばれるとともに、コンビナトリアル計算法学寄附講座も合わせ、多いときには200名を超えるような組織を作り上げることが出来た。多彩な学問分野を背景とする国内外からの多くの若手教員、国内外からの多彩な産業社会分野の客員教授、世界各国からの留学生、多くの企業からの社会人博士、プログラマー、技術補佐員などのスタッフが充実すると、コンピュータ化学を自動車、半導体・エレクトロニクス、環境、機械産業、電池、化学、原子力、スノースポーツ、トイレなど住宅設備、建築、医療など多彩な産業分野に展開するとともに、そのための多くのソフトウェアの構築が進んだ。さらにそれが多彩な産学官

連携研究も生み出した。「学問を社会に生かし、社会から新しい学問を育む」という目標も生まれた。2012年には文科省定員の教授は定年となったが、外部資金によるNICHe教授・プロジェクトリーダーとして多くのメンバーとともに様々な産学連携研究をそれも定年となる2018年まで続けた。

このように、触媒から始まったコンピュータ化学であるが、多彩な産業分野に拡がり、その期待に応えるために新しい方法論、プログラム開発も進められた。進化する社会と学問の具体例を様々な形で実感する機会となった。

#### 4. 未来社会の創造・革新に繋がる方法論 (コンピュータ化学の未来像)

50余年にわたり、多くの共同研究者とともに、様々な研究に携わってきた。同じように取組んでも発展する場合もあればないこともある。それを多く繰り返す中で、理由を考えることになるが、社会も学問も急速に進化していることを実感することになった。様々な分野への多彩な産学官国際連携により試行錯誤的に進める中で体感したコンピュータ化学の発展の未来像を方法論の観点で纏めてみる。

(1) CG、VR、AR 可視化 (電子、原子、分子、材料の世界の見える化: 誰もが科学の成果を知り、活用できる社会のために) [9-23]

様々な分野にコンピュータ化学が応用されたとはいえ、触媒研究者、トライボロジー研究者、半導体研究者、原子力研究者、スポーツ研究者・選手の殆どは、コンピュータ化学を知らない。コンピュータ化学で重要と

なる波動関数、軌道、原子、分子、マイクロ構造、マクロ構造は分かりにくいし、それが生み出す様々な働き、機能も理解しにくい。それをどのように実験研究者・現場を担う方々に伝えるか。最初に注目し、いつも重視したのが、可視化手法である。コンピュータ化学の知識を出来るだけの確に実験研究者・現場の方々にお伝えして、技術革新・改良、産業革新に繋げて頂くことが重要と考えてきた。最近では、専門家だけでなく、一般の市民・子供達にも最先端の成果、技術の内容を理解して頂くことが重要となっているので、バーチャルリアリティ (VR)、拡張現実 (AR) も含めて、環境が整備されている。

コンピュータ化学における見える化の重要性を述べたが、それだけでなく様々な実験についてもそれを他の分野の方々、また専門家でない人、一般の方々、さらには子供達にも分かり易く伝えることが重要になっている。多彩な人に価値が伝わることにより、予想もしないような新しい発展の可能性が育まれる。コンピュータ技術を活用する可視化には、そのような魅力がある。

## (2) マルチスケール・マルチフィジックス計算化学 (多彩かつ斬新な応用を推進する方法論) [24-147]

約20年間の多様な触媒に関する実験研究を経て、30数年前、コンピュータ化学を始めることになった。コンピュータ化学の大きな可能性、未来を感じ取ったためであるが、実際に取り組んでみると、量子化学のソフトウェアが中心で、それらも有機化合物やクラスター、単純固体に限られ、自分が実験で扱ってきたような触媒は勿論、産

業の中で重要となる現実材料の開発において有効な貢献をするには大きなギャップを感じた。そこで、研究室メンバーが一致協力して、必要な方法論、ソフトウェアは全て開発することにした。長い時間は要したが、既存のソフトウェアよりも5000倍高速化した量子化学計算手法、1000万倍高速化した量子分子動力学手法、摩擦磨耗専用分子動力学手法、電気伝導度計算手法、熱伝導度計算手法、拡散係数計算手法、粘性係数計算手法、結晶成長専用計算手法、光吸収・発光計算手法など多くのソフトウェアを量子化学、分子動力学、量子分子動力学などマイクロ理論ベースから計算できる手法を開発した。

電子、原子レベルのマイクロシミュレーションは、非経験的な材料特性の理解、予測に有効であるが、それだけでは、実用材料の的確な予測、設計には繋がらない。メソ、粒子レベルでのシミュレーションが不可欠となるがそのような手法を開発した。空隙率、粒径分布、細孔分布など多孔体の特性をもとに、多様な構造をモデリングできる。それらは、直接、電子顕微鏡像とも比較できる。このようにメソ構造がモデル化されると、マイクロ物性をもとに、メソレベルでの電気伝導、イオン伝導、拡散、強度、光吸収・散乱特性が評価され、それをベースに製品・部品レベルでのマクロシミュレーションと関係させることが出来る。このような、マルチスケール、マルチフィジックスシミュレーション手法が多彩な産業応用の基礎となる。今後も社会の進化により様々な産業分野が生まれることが予想されるが、マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション手法はそれらを強力に支援する。

マイクロレベルの熱触媒反応のシミュレーションに限れば、方法論もかなり整備されてきて容易になってきているが、それに電気伝導、イオン伝導、光吸収・発光など他の物理を含めたシミュレーションは少ないが、センサー、光触媒など多彩な新しい応用への可能性を開拓することが出来る。単に実験結果の解釈に留まらず、思いもしない発見をマルチスケール・マルチフィジックス計算化学により導く可能性も生まれる。マルチスケール・マルチフィジックス計算化学はそのような新しい時代に期待される方法論である。

### (3) 実験融合マルチスケールマルチフィジックス計算化学(実験・計測をも融合した方法論) [2-4, 136]

本当にモデル化した構造が現実材料を忠実に反映したものになっているかの確認も重要となる。東北大学での液体金属触媒研究のあと、名古屋大学で自動車排ガス浄化触媒を研究し、Pt, Pd, Rh など微量の貴金属の存在が非常に重要と知った時、非常に不思議に思った経験がある。遷移金属では、s, p 軌道に加え、d 軌道の存在が非常に重要であるので、分子の活性化の観点では、d 軌道に殆ど空きのない貴金属よりも Fe, Mn, Mo, W などの方が有利のはずである。実際に  $N_2$  の活性化が重要となるアンモニア合成では、Fe 系触媒が有効である。少し考えると、排ガス中に  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$  も存在する反応条件では、Fe は  $Fe_2O_3$ ,  $Fe_3O_4$  などの酸化物となり、分子の活性化能力が低下し、貴金属の存在が重要との結論に到達するのであるが、そのことは、コンピュータ化学でのシミュレーションを行う際にも、

実際の触媒の構造を的確にモデル化することの重要性を示している。幸い、複雑固体についても、多様な計測技術が大きく発展している。X線構造解析、中性子線構造解析、赤外分光、ラマン分光などそれぞれ特徴ある情報が得られる。それらの計測シミュレータをコンピュータモデリング像に適用することにより、的確なモデリングが実現する。そのようなリアルな構造をもとに、マルチスケール・マルチフィジックス計算化学を適用すると、的確な物性、機能予測を行うことが出来る。同時に、雰囲気変化、反応条件変化に基づく構造変化を考慮したシミュレーションを行うことにより、新しい機能の予測にも繋げることが出来る。

宇宙に存在する様々な天体を眺め、また宇宙から地球の姿を見ると、我々が生活する地球が如何に特殊な環境にあるかを知ることになる。それ故、私達が目にする自然、人工物もそのような地球上での特殊環境下で実現する物質の特殊形態として理解出来る。実験融合マルチスケール・マルチフィジックス計算化学は、物質世界で存在可能な様々な系への適用性を持ちつつも、我々が日々接し、観察する自然・人工物に対する実験結果を的確にシミュレーション出来ることを保証された手法となる。それ故、的確な物性、機能予測を行うとともに、雰囲気変化、反応条件変化に基づく構造変化を考慮したシミュレーションを行うことにより、新しい機能の予測にも繋げることが可能となる。

### (4) コンビナトリアル計算化学(新材料・新システムの高速・高精度開発を可能とする方法論) [148-160]

新規医薬品開発のために有機化合物の骨格と各種置換基の様々な組み合わせを高速に合成するコンビナトリアルケミストリーが生まれたのは、30年余も以前であるが、その後、その概念を様々な材料に発展させる研究が進み、その中で、我々は、その概念を計算化学に計算化学に導入したコンビナトリアル計算化学を開始した。周期表のありとあらゆる元素の機能を計算化学により高速に予測することにより、計算化学を材料開発のための高速スクリーニング手法として活用する新しい方法論である。先ずは、比較的小規模な量子化学計算で可能な活性点予測で有効性が示され、様々な系に適用されている。

昨年来の新型コロナウイルス感染症のためのワクチン開発、医薬品開発への期待からも分かるように、新しい安全安心な医薬品、材料、システムの高速開発への世界の期待は非常に高まっている。自分自身は、現在は、若手メンバーを支援・応援する立場になっているが、現象論的・統計的な人工知能手法に加え、ミクローメゾマクロレベルのリアル構造の化学・物理に基づく実験融合マルチスケール・マルチフィジックス手法を基礎とするコンビナトリアル計算化学の将来にも大いに期待している。

## 5. むすび (若い世代への期待)

社会、世界はどんどん進化して行く。それに伴いそれを導く学問も進化する。新しい学問が新しい技術・社会の実現を加速する。僅か70余年、大学だけでは50余年の変化であるが、その理由を探ろうとすると人類の歴史への興味が生まれ、また、未来への想像も広がる。

研究の具体的な応用に関しては、比較的社会変化の影響を受けやすい。公害問題の解決に貢献したいと一生懸命に取り組んだ、火力発電所や自動車エンジンの排ガス処理触媒は、関係する企業の方々の尽力により、世界的な成功を収めてきたが、現在では、地球温暖化問題からの逆風も吹いている。そのかわり、SDGsに係る様々な新しい課題が生まれ、新たな発展が期待されている。ただ、それらも2030年が達成目標年であるので、数十年、数百年先の社会ニーズの進化は計り知れない。それだけ、若い世代には大きなチャンスがあることも意味する。

コンピュータ化学など方法論の方は、比較的連続的な進化を続ける。世界で最初のコンピュータは、約2万本の真空管からなるもので、自分とほぼ同じ頃に誕生した。それが、着実な進化を続け、現在経験しているように、社会、学問に非常に大きな影響を与えており、今後も様々な形での飛躍的な発展が期待されている。それに伴い、前節で述べたようにコンピュータ化学も大きく発展するものと考えている。社会ニーズの進化に比べれば遅いとはいえ、コンピュータ化学の数十年前、数百年先の進化は想像も出来ないが、どのような未来が拓けるのか非常に楽しみであり、それを担う若い世代への期待も広がる。それらを、更に急速に進化する社会ニーズを先取りする形で活用することも楽しみにしている。

## 文献

- 1) 宮本 明、「触媒学会・触媒研究の思い出」、触媒懇談会ニュース、No. 99 (2017).
- 2) 宮本 明、「進化する社会と学問: コンピュータ化学との出会いと未来に生きる世代

- への期待」、*Journal of Computer Chemistry, Japan*, 印刷中。
- 3) 宮本 明、「社会の役に立つコンピュータ化学」、*応用物理*, **80**, (2011)594-597
  - 4) 宮本 明、「産業革新のための実践的コンピュータ化学」、*化学と工業*, **68**, (2015)827-829
  - 5) 宮本 明、斎藤保夫、荻野義定、「熔融状金属の触媒作用」、*化学の領域*, **25** (1971) 724-731.
  - 6) 宮本 明、村上雄一、「金属酸化物の活性サイトとその働き」*触媒*, **26** (1984) 177-183.  
宮本 明、村上雄一、「担持酸化バナジウム触媒の表面構造と触媒作用」、*表面科学*, **5** (1984) 65-66.
  - 7) 宮本 明、村上雄一、「量子化学による実用触媒の設計」、*フィジックス*, **6** (1985) 540-544.
  - 8) 加藤 明、宮本 明、「固定発生源からのNO<sub>x</sub>、SO<sub>x</sub>浄化プロセス」、*触媒*, **31** (1989) 578-583.
  - 9) 宮本 明、岩本伸司、阿草清滋、乾 智行、「コンピュータ・グラフィックによる触媒設計支援」、*化学工学*, **53** (1989) 284-286.
  - 10) 乾 智行、宮本 明、「コンピュータ・グラフィックによる触媒設計支援」、*ケミカルエンジニアリング*, **34** (1989) 322-327.
  - 11) 乾 智行、宮本 明、「コンピュータグラフィックによる機能性材料の開発」、*化学*, **44** (1989) 382-387.
  - 12) 宮本 明、乾 智行、「コンピューター・グラフィックによる酸化物表面の視覚化」、*表面科学*, **11** (1990) 45-52.
  - 13) 宮本 明、乾 智行、「コンピュータグラフィックによる触媒設計支援」、*触媒開発におけるコンピュータ利用*, (1990) 24-31.
  - 14) 宮本 明、乾 智行、「固体触媒の視覚化と設計」、*化学と工業*, **44** (1991) 809-814.
  - 15) 片桐昌彦、久保百司、宮本 明、「分子動力学法とコンピュータグラフィックスの触媒研究への応用」、*触媒*, **36** (1994) 50-56.
  - 16) 宮本 明、高羽洋充、片桐昌彦、久保百司、Rajappan Vetrivel、「CGによる超臨界抽出過程の視覚化と分子シミュレーション」、*化学工学*, **58** (1994) 676-678.]
  - 17) 宮本 明、久保百司、「原子・分子を見る・つかむ」、*化学工学*, **60** (1996) 33-34.
  - 18) 久保百司、山田谷導幸、三浦隆治、姫井浩明、宮本 明、「分子グラフィックス」、*CICSJ Bulletin*, **13** (1995) 15-18.
  - 19) 宮本 明、「第2回物質・材料設計のための仮想実験技術シンポジウム」、*化学*, **51** (1996) 526.
  - 20) 三浦隆治、宮本 明、「バーチャルリアリティによる材料設計」、*化学*, **52** (1997) 16-17.
  - 21) 高羽洋充、三浦隆治、水上浩一、久保百司、宮本 明、「触媒設計のための仮想環境」、*日本シミュレーション学会誌*, **16** (1997) 11-19.
  - 22) 谷島健二、高見誠一、久保百司、宮本明、「目で見える触媒、吸着剤の働き」、*化学と教育*, **48** (2000) 78-83.
  - 23) 宮本 明、久保百司、高見誠一、鈴木研、「複合機能材料の可視化と分子設計」、*大学・高専研究機関の研究情報*, **9** (1999) 44-45.
  - 24) 宮本 明、「ゼオライト内の原子の動きを再現する」、*化学*, **47** (1992) 322-323.
  - 25) 宮本 明、久保百司、「触媒開発とコンピュータシミュレーション」、*PETROTECH*, **15** (1992) 922-926.

- 26) 宮本 明、服部 忠、御園生誠、「触媒」、工業材料、40 (1992) 25-29.
- 27) 宮本 明、久保百司、香川公司、松葉勝彦、乾 智行、「分子挙動シミュレーション」、分離技術、22 (1992) 127-129.
- 28) 宮本 明、久保百司、「コンピュータケミストリーを通して見た触媒像」、応用物理、62 (1993) 352-359.
- 29) 宮本 明、高羽洋充、久保百司、「金属酸化物表面のエピタキシャル成長過程の分子シミュレーション」、化学工学、57 (1993) 291-292.
- 30) 宮本 明、久保百司、「ナノ領域での分析化学の新展開 III. 適用例； 触媒」、ぶんせき、(1993) 814-816.
- 31) 宮本 明、「コンピュータが考える未来の化学」、化学、49 (1994) 12-13.
- 32) 宮本 明、高羽洋充、久保百司、Rajappan Vetrivel、「超臨界抽出過程の分子シミュレーション」、分離技術、24 (1994) 264-266.
- 33) 宮本 明、高羽洋充、長谷川賢、片桐昌彦、久保百司、「膜透過の分子シミュレーション」、膜、20 (1995) 126-134.
- 34) 久保百司、三浦隆治、高羽洋充、片桐昌彦、宮本 明、「分子動力学シミュレーションについて」、ケミカルエンジニアリング、40 (1995) 111-115.
- 35) 近江靖則、姫井浩明、遠藤 明、山内亮、三浦隆治、久保百司、Ewa Broclawik、宮本 明、「固体触媒反応におけるコンピュータ化学」、日本エネルギー学会誌、74 (1995) 373-377.
- 36) 宮本 明、「コンピュータ支援分子設計・材料設計」、青葉工業会報、39 (1995) 10.
- 37) 宮本 明、「コンピュー化学：注目研究と動向」、触媒技術の動向と展望 (1995) 61-70.
- 38) 山内 亮、宮本 明、「材料化学における量子化学計算」、BREAKTHROUGH、120 (1996) 16-19.
- 39) 宮本 明、「触媒と表面科学の夢」、表面科学、17 (1996) 181.
- 40) 宮本 明、「触媒のコンピュータ化学にかける夢」、触媒、38 (1996) 319.
- 41) 高羽洋充、宮本 明、「分離技術における分子シミュレーション」、化学工学、60 (1996) 679-681.
- 42) 三浦隆治、宮本 明、「分子動力学計算システムの開発と応用」、化学工業、(1996) 687-693.
- 43) 田村宏之、三浦隆治、高羽洋充、久保百司、宮本 明、「表面化学の最近の進展」、トライボロジスト、42 (1997) 689-694.
- 44) 高羽洋充、久保百司、宮本 明、「触媒設計と材料設計学」、FINE CERAMICS REPORT, 15 (1997) 80-84.
- 45) 近江靖則、叶木朝則、高羽洋充、久保百司、宮本 明、「計算化学によるゼオライト研究の新展開」、ゼオライト、14 (1997) 145-152.
- 46) 近江靖則、三浦隆治、高羽洋充、久保百司、寺石和夫、宮本 明、「材料設計のための計算化学システムの開発と応用」、大阪大学大型計算機センターニュース、27, No. 3 (1997) 11-18.
- 47) 高羽洋充、近江靖則、久保百司、寺石和夫、宮本 明、「分子動力学法を用いた触媒研究」、触媒、40 (1998) 148-153.
- 48) 宮本 明、寺石和夫、久保百司、「分子シミュレーション工学」、化学工学、62 (1998) 514-514.

- 49) 宮本 明、「私の研究観」、CAMM NEWS、Vol. 15 (1998) 1-2.
- 50) 宮本 明、「私の研究観」、Business Research、6月号 (1998) 71-73.、社団法人 企業研究会
- 51) 宮本 明、「コンピュータケミストリーの進化論」、スメクタイト研究会、News Letter 15 (1998) 6-7.
- 52) 近江靖則、久保百司、寺石和夫、宮本明、「ケイ酸塩鉱物へのコンピュータケミストリーの応用」、スメクタイト、8 (1998) 20-27.
- 53) 鶴谷浩隆、植田裕介、遠藤 明、近江靖則、久保百司、寺石和夫、S. C. Ammal、宮本 明、「固体触媒シミュレーション技術の現状とメタン活性化への応用」、資源と環境、7 (1998) 181-195.
- 54) 小林泰則、高羽洋充、水上浩一、近江靖則、久保百司、寺石和夫、宮本 明、「気体分離膜開発支援のための新規モンテカルロ手法の開発」、ケミカルエンジニアリング、43 (1998) 616-621.
- 55) 近江靖則、水上浩一、久保百司、寺石和夫、宮本 明、「ゼオライト外表面の特異的なポテンシャル場と分子の動き」、触媒、41 (1999) 20-24.
- 56) 水上浩一、谷島健二、久保百司、宮本明、「コンピュータ化学による環境保全・汚染物質の除去技術」、粉体工学会誌、36 (1999) 121-129.
- 57) 高見誠一、久保百司、宮本 明、「計算化学によるデバイス材料の設計・製作支援」、応用物理、68 (1999) 411-414.
- 58) 水上浩一、寺石和夫、宮本 明、「計算化学によるダイオキシン分解触媒の設計支援」、ペトロテック、22 (1999) 233-238.
- 59) 鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本明、「計算化学による材料設計の新展開」、JCPE Newsletter、10 (4) (1999) 3-11.
- 60) 近江靖則、久保百司、宮本 明、「触媒設計はどこまで可能か」、高分子、48 (1999) 328-331.
- 61) 田村宏之、宮本 明、「高分子系への分子動力学法の応用」、日本ゴム協会誌、72 (1999) 653-658.
- 62) 高見誠一、久保百司、宮本 明、「計算科学を用いた触媒研究」、超精密、9 (1999) 77-84.
- 63) 小野津崇之、近江靖則、久保百司、宮本明、「分子動力学法を用いた触媒研究」、化学工業、50 (1999) 450-456.
- 64) 水上浩一、小林泰則、高見誠一、久保百司、宮本 明、「コンピュータシミュレーションで見るナノスペースでの挙動」、表面科学、21 (2000) 32-38.
- 65) 久保百司、高見誠一、宮本 明、「分子シミュレーションによる複酸化物の表面・界面」、表面科学、21 (2000) 81-88.
- 66) 水上浩一、鈴木 愛、寺石和夫、高見誠一、久保百司、宮本 明、「ダイオキシン分解反応に対する計算化学の展開」、JCPE Journal、12 (2000) 3-12.
- 67) 小野津崇之、山田有場、高見誠一、久保百司、宮本 明、「材料開発と計算化学」、表面、38 (2000) 20-29.
- 68) 久保百司、高見誠一、宮本 明、「クラスターによる結晶成長プロセスの原子レベルダイナミックス」、エアロゾル研究、15 (2000) 220-225.
- 69) 宮本 明、高見誠一、久保百司、「分子シミュレーション工学」、化学工学、64 (2000) 542.

- 70) 田村宏之、宮本 明、「分子動力学法による潤滑剤の挙動解析」、トライボロジスト、45 (2000) 655-660.
- 71) 宮本 明、「コンピュータケミストリーにかける夢」、PETROTECH、23 (2000) 856-857.
- 72) 高見誠一、久保百司、宮本 明、「研究活動におけるインターネット利用法」、触媒、43 (2001) 41-45.
- 73) 黒川 仁、谷島健二、鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本 明、「分子シミュレーションの応用」、ケミカルエンジニアリング、46 (2001) 43-48.
- 74) 宮本 明、久保百司、高見誠一、「コンピュータケミストリーによる新しい工学の推進」、九葉会会報、66 (2001) 24.
- 75) 宮本 明、「触媒のコンピュータケミストリー」、CICSJ Bulletin、19 (2001) 19.
- 76) 田村宏之、宮本 明、「シミュレーション技術への導入」、トライボロジスト、46 (2001) 309-310.
- 77) 鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本明、「化学電池材料の分子設計」、ケミカルエンジニアリング、46 (2001) 436-442.
- 78) 鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本明、「材料開発の世界を切り開く計算化学とその最新の成果」、工業材料、49 (2001) 89-93.
- 79) 安藤美奈子、鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本 明、「コンピュータシミュレーションによる触媒材料設計」、セラミックデータブック、29 (2001) 39-42.
- 80) 鈴木 研、高見誠一、久保百司、宮本明、「高速化量子分子動力学プログラムの開発」、化学工業、53 (2002) 274-280.
- 81) 高見誠一、横須賀俊之、草谷友規、鈴木研、久保百司、宮本 明、「高速化量子分子動力学法による核生成、成長のシミュレーション」、粉体工学会誌、39 (2002) 459-463.
- 82) 久保百司、高見誠一、宮本 明、「分子シミュレーション工学」、化学工学、66 (2002) 644-645.
- 83) 伊藤優基、黒川 仁、遠藤 明、久保百司、宮本 明、「レアメタル分野の計算化学」、金属、72 (2002) 1100-1104.
- 84) 久保百司、安藤美奈子、伊藤優基、遠藤明、今村 詮、宮本 明、「Ziegler-Natta 触媒上でのプロピレン重合ダイナミクス的高速化量子分子動力学法による検討」、高分子加工、51 (2002) 562-569.
- 85) 久保百司、高見誠一、宮本 明、「新機能エレクトロニクス材料創製のための結晶成長シミュレータの開発とその応用」、応用物理学会スクールBテキスト「次世代材料用新薄膜作製技術の基礎と応用」、(2002) 41-56.
- 86) 高見誠一、横須賀俊之、久保百司、宮本明、「計算化学を用いたナノ粒子の挙動解明」、粉砕、46 (2002) 45-50.
- 87) 横須賀俊之、篠田克己、遠藤 明、久保百司、宮本 明、「高速化量子分子動力学法の電気・電子分野への応用」、電気学会論文誌 A、123 (2003) 114-117.
- 88) 神戸正純、高塚 威、宮本 明、「分子シミュレーションによるケミカル汚染物質の吸着挙動解析」、クリーンテクノロジー、13 (2003) 58-61.
- 89) 宮本 明、「産業の現場で役立つ計算化学を目指して」、触媒、405 (2003) 403.
- 90) 篠田克己、伊藤優基、遠藤 明、久保百司、宮本 明、「材料設計におけるコンピュータの役割」、セラミックデータブック、31

(2003) 59-62.

91) 久保百司、遠藤 明、宮本 明、「日本再生を目指した情報化学教育」、CICSJ Bulletin、21 (2003) 52-53.

92) 大山高裕、遠藤 明、久保百司、宮本明、「計算化学によるトライボロジーへの新しいアプローチ」、トライボロジスト、49 (2004) 4-8.

93) 久保百司、古山通久、宮本 明、「量子分子動力学法に基づく化学反応対応型連成現象シミュレータの開発」、化学工業、55 (2004) 663-671.

94) 久保百司、鐘 慧峰、坪井秀行、古山通久、宮本 明、「Ziegler-Natta 触媒の量子分子動力学計算」、触媒、46 (2004) 650-655.

95) 久保百司、坪井秀行、古山通久、宮本明、「量子分子動力学法に基づく化学機械研磨プロセスシミュレータの開発」、砥粒加工学会誌、49 (2005) 366-369.

96) 久保百司、坪井秀行、古山通久、宮本明、「半導体プロセスにおける化学反応の電子・原子レベル制御—量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発」、応用物理、74 (2005) 1052-1059.

97) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計 第 1 回：分子動力学法の基礎と燃料電池への応用」、燃料電池、5(1) (2005) 102-106.

98) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計 第 2 回：量子化学計算の基礎と固体高分子形燃料電池電解質への応用」、燃料電池、5(2) (2005) 107-112.

99) 久保百司、坪井秀行、古山通久、宮本明、「計算化学を活用したプラズマディスプレイ用保護膜の理論設計：ナノドット構造形成による性能向上の予測」、ナノ学会誌、4 (2005) 31-37.

100) 宮本 明、「実践的コンピュータ化学によるモノ造りの革新」、工明会誌、58 (2006) 6-6.

101) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計 第 3 回：SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法の基礎と固体高分子形燃料電池電極反応への応用」、燃料電池、5(3) (2006) 104-108.

102) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Carpio Carlos、宮本 明、「計算化学が拓く新しい材料—多分野での応用例と展望」、未来材料、6(3) (2006) 8-15.

103) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「実践的マルチスケール計算化学のための 3 次元多孔質シミュレータの開発と応用」、材料マニュアル、23 (2006) 26-30.

104) 徳増 崇、坪井秀行、古山通久、遠藤明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計 第 4 回：電子状態を考慮した分子動力学法の基礎と燃料電池触媒反応現象解析への応用」、燃料電池、5(4) (2006) 111-116.

105) 古山通久、坪井秀行、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計 第 5 回：SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に基づく

- 電気伝導特性・熱伝導特性の定量予測の基礎と応用」、燃料電池、6(1)(2006)114-118.
- 106) 古山通久、服部達哉、坪井秀行、畠山望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計第6回：三次元多孔質シミュレータに基づくマルチスケール計算化学への展開」、燃料電池、6(2)(2006)151-154.
- 107) 高塚 威、永坂茂之、宮本 明、「低湿度雰囲気における液晶用ガラス基板表面への吸着水分量－産業用クリーンルーム環境における汚染対策指針づくりのために」、クリーンテクノロジー、17(2)(2007)41-44.
- 108) 宮本 明、「発展する産業コンピュータ化学：新時代のモノ造りへの挑戦」、膜、32(2007)61.
- 109) 高羽洋充、坪井秀行、古山通久、畠山望、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「液相系膜分離における計算化学の応用展開」、膜、32(2007)80-88.
- 110) 古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「固体高分子形燃料電池用プロトン伝導性電解質の計算化学」、膜、32(2007)89-94.
- 111) 古山通久、服部達哉、鍾 慧峰、坪井季行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「量子分子動力学法と多孔質シミュレータによる固体高分子形燃料電池電極の理論設計」、Electrochemistry (電気化学および工業物理化学)、75(2007)411-417.
- 112) 小野寺 拓、古山通久、久保百司、宮本 明、「量子分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータの開発とトライボケミカル反応ダイナミクスへの応用」、トライボロジスト、52(2007)488-494.
- 113) 高羽洋充、古山通久、坪井秀行、畠山望、遠藤 明、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、「シミュレーションによる材料設計技術」、化学工学、71(2007)504-508.
- 114) Carlos A. Del Carpio、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、一石英一郎、宮本 明、「タンパク質間相互作用推定および評価のためのコンピュータシステム MIAX の応用」、生体の科学、58(2007)342-346
- 115) 遠藤 明、芹澤和実、大沼宏彰、坪井秀行、古山通久、高羽洋充、久保百司、梶山博司、篠田 傅、宮本 明、「量子論に基づく MgO 保護膜の電子放出特性・二次電子放出係数の予測シミュレータの開発」、月刊ディスプレイ、14(2008)19-23.
- 116) 久保百司、古山通久、宮本 明、「SCF-Tight-Binding 量子分子動力学計算プログラム Colors の開発とマルチフィジックス現象ダイナミクスへの応用」、ペトロテック、31(2008)213-219.
- 117) Akira Miyamoto、”Quantum Design of Nano Functional Materials”, Science & Technology in Japan, 22(87)(2003)34-34.
- 118) 畠山 望、長山千恵子、畑 北斗、石澤由紀江、佐藤 亮、ボノー パトリック、三浦隆治、鈴木 愛、宮本 明、「マルチスケール計算化学に基づく汚れ付着シミュレーション技術の開発」、Journal of Computational Chemistry, Japan, 15(2016), 221-222.
- 119) 河野雅弘、畠山 望、蓮池利章、宮本 明、「計算化学による生体分子の結合、運搬、代

- 謝の機構解明 “ヘモグロビンとミオグロビンによる酸素および二酸化炭素の磁気的な結合”」、*Journal of Computational Chemistry, Japan*, **15** (2016), 232-234.
- 120) 畠山 望, 三浦隆治, 宮本直人, 宮本明、「計算化学を用いた材料開発とバイオ分野への応用」、*Pharm Stage*, **18**(8), (2018), 47-52.
- 121) 畠山 望, 大串巧太郎, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本 明、「トライボシミュレータの開発」、数値解析と表面分析によるトライボロジー現象の解明とその制御, 第6章 数値解析, 第12節 (テクノシステム, 2018年3月), pp. 455-461.
- 122) 畠山 望, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本明、「東北大学におけるオープンイノベーションと *in silico* 技術の開発」、*in silico* 創薬におけるスクリーニングの高速化・高精度化技術, 第7章 オープンイノベーションによる *in silico* 技術開発の取り組みと今後の活用, 第2節 (技術情報協会, 2018年1月31日), pp. 512-519.
- 123) 畠山 望, 岡島淳之介, 岡部孝裕, 宮本直人、「スキーワックス開発を高度化する計算化学と高精度計測」、*化学工学*, **82**(2), (2018), 70-73.
- 124) 畠山 望, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本明、「シンタリングによる触媒劣化のシミュレーション」、触媒劣化—原因、対策と長寿命触媒開発—, 第1編 基礎, 第3章 触媒劣化の解析, 第6節 (シーエムシー出版, 2018), pp. 126-131.
- 125) 大串巧太郎, 三浦隆治, 鈴木 愛, 畠山 望, 宮本 明、「なじみ・焼付きを解析可能なメソトライボロジーシミュレータの開発」、自動車技術, **71**(11), (2017), 83-88.
- 126) 畠山 望, 宮本 明、「表面・界面反応の超高速化量子分子動力学シミュレーション」、表面・界面技術ハンドブック～材料創製・分析・評価の最新技術から先端産業への適用、環境配慮まで～, 第2編 表面・界面を観る, 測る, 予測するには, 第2章 各論, 第5節 表面・界面形成過程を予測するには, 第2項 (エヌ・ティー・エス, 2016), pp. 354-360.
- 127) 磯村明宏, 畠山 望, 八重樫祐介、「スキー用ワックスの開発—秘伝と計算化学の融合」、*化学と教育*, **63**(11), (2015), 532-535.
- 128) 畠山 望, 三浦 舞, 小原幸子, 石澤由紀江, 大串巧太郎, 三浦隆治, 鈴木 愛, 磯村明宏, 宮本 明, 八重樫祐介, 佐藤純一, 藤田慶一郎、「計算化学を活用したスキーワックスの開発」、*シーハイル*, **84**, (2015), 10-11.
- 129) 宮本 明, 畠山 望, 鈴木 愛, 三浦隆治、「二次電池技術開発支援のためのマルチスケール・マルチフィジックス計算化学」、*セラミックス*, **49**(11), (2014), 936-943.
- 130) 宮本 明, 畠山 望, 鈴木 愛, 三浦隆治、「産業革新のための実践的計算化学—低炭素技術への応用」、*応用物理*, **83**(2), (2014), 116-120.
- 131) 鈴木 愛, 大野由佳, Mark C. Williams, 三浦隆治, 畠山 望, 堀 美知郎, 宮本 明、「中温型燃料電池 (HT-PEMFC) 用電極触媒の粒成長およびプロトン伝導低下が及ぼす電圧降下への影響」、*燃料電池*, **13**(3), (2014), 54-61.
- 132) 宮本 明, 三浦隆治, 鈴木 愛, 畠山 望、「量子分子動力学法による潤滑プロセスにおけるトライボケミカル反応の解明」、ト

- ライボロジスト, 58(9), (2013), 610-615.
- 133) 宮本 明, 畠山 望, 鈴木 愛, 三浦隆治, 「量子化学が創る新しい化学工学」、化学工学, 77(6), (2013), 382-386.
- 134) 鈴木 愛, 三浦隆治, 畠山 望, 宮本明, 「d軌道を有する金属元素の凝集性評価」、触媒の設計・反応制御 事例集, 第12章 触媒構造・反応の分析・評価, 第5節(技術情報協会, 2013), pp. 743-747.
- 135) 鈴木 愛, 畠山 望, 高羽洋充, 宮本明, 「触媒の劣化シミュレーション」、触媒, 52(1), (2010), 8-14.
- 136) 久保百司, 扇谷 恵, 小野寺真理, 鈴木 愛, 古山通久, 坪井秀行, 畠山 望, 遠藤明, 高羽洋充, 宮本 明, 「色素増感型太陽電池デバイスの量子論に基づくマルチスケールシミュレータの開発と応用」、日本化学会情報化学部会誌, 27(5), (2009), 119-123.
- 137) 高羽洋充, 鈴木 愛, 坪井秀行, 畠山望, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「燃料電池の理論評価のための実験融合マルチスケール計算化学手法の開発」、燃料電池, 9(2), (2009), 18-23.
- 138) 高羽洋充, 鈴木 愛, 坪井秀行, 畠山望, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「計算化学の応用展開」、膜, 34(4), (2009), 212-219.
- 139) 高羽洋充, 鈴木 愛, 坪井秀行, 畠山望, 遠藤 明, Carlos A. Del Carpio, 久保百司, 宮本 明, 「新しい計算化学的アプローチによる機能性分離材料のシミュレーション」、分離技術, 39(3), (2009), 27-32.
- 140) 高羽洋充, 鈴木 愛, 坪井秀行, 畠山望, 遠藤 明, 久保百司, 宮本 明, 「リチウム二次電池正極材料の結晶構造と電子構造の計算化学的解析と電極特性」、高性能蓄電池—設計基礎から開発, 評価まで—, 第1章 (エヌ・ティー・エス, 2009).
- 141) 古山通久, 金 寶英, 服部達哉, 鈴木 愛, Riadh Sahnoun, 坪井秀行, 畠山 望, 遠藤 明, 高羽 洋充, Carlos A. Del Carpio, 久保 百司, 宮本 明, 「固体高分子形燃料電池触媒層に対するマルチスケール計算化学アプローチ」、伝熱, 47, (2008), 14-19.
- 142) A. Endou, A. Nomura, Y. Sasaki, K. Chiba, H. Hata, K. Okushi, A. Suzuki, M. Koyama, H. Tsuboi, N. Hatakeyama, H. Takaba, M. Kubo, C. A. Del Carpio, M. Kitada, H. Kabashima and A. Miyamoto, “A Theoretical Study on Chemical Reaction of Water Molecules under Laser Irradiation: Ultra-Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach”, NSTI-Nanotech 2008 (The CRC Press, 2008), Vol. 3, pp. 713-716.
- 143) N. Hatakeyama, A. Nomura, Y. Sasaki, K. Chiba, H. Hata, K. Okushi, A. Suzuki, M. Koyama, H. Tsuboi, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, C. A. Del Carpio, M. Kitada, H. Kabashima and A. Miyamoto, “Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Mechanochemical Reaction of Micro-Bubble Induced by Shock Wave”, Clean Technology 2008 (The CRC Press, 2008), pp. 491-494.
- 144) H. Takaba, A. Nomura, Y. Sasaki, K. Chiba, H. Hata, K. Okushi, A. Suzuki, H. Tsuboi, M. Koyama, N. Hatakeyama, A. Endou, M. Kubo, C. A. Del Carpio, M. Kitada, H. Kabashima and A. Miyamoto, “Multi-level Computational Chemistry Approach for Phase Change Behavior of

- Water induced by Laser Irradiation”, Clean Technology 2008 (The CRC Press, 2008), pp.487-490.
- 145) 遠藤 明, 芹澤和実, 大沼宏彰, 鈴木愛, 古山通久, 坪井秀行, 畠山 望, 高羽洋充, Carlos A. Del Carpio, 久保百司, 宮本明, 「PDP 用保護膜、蛍光体に関するシミュレーション」、ラボレベル、研究初期で必要となる発光素子、発光デバイス開発のための基礎技術、装置、測定、評価法, 第 9 章 (情報機構, 2008), pp. 203-211.
- 146) 遠藤 明, 大沼宏彰, 菊地宏美, 坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 高羽洋充, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, 梶山博司, 篠田 博, 宮本 明, 「PDP 材料に関するシミュレーション」、プラズマディスプレイ材料技術の最前線, 第 2 章 PDP 用部材・材料と PDP 作成プロセス, 第 2 節 (シーエムシー出版, 2007), pp. 78-88.
- 147) 古山通久, 服部達哉, 坪井秀行, 畠山望, 遠藤 明, 高羽洋充, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明, 「基礎講座：統合化計算化学手法による燃料電池材料設計第六回：三次元多孔質シミュレータに基づくマルチスケール計算化学への展開」、燃料電池, 6(2), (2006), 151-154.
- 148) 久保百司, 高見誠一, 宮本 明, 「コンビナトリアル計算化学」、化学工業, 50 (1999) 71-75.
- 149) 高見誠一, 久保百司, 宮本 明, 「化学工学へのコンビナトリアルケミストリーのインパクト」、化学工学, 64 (2000) 281-282.
- 150) 鈴木 研, 高見誠一, 久保百司, 宮本明, 「コンビナトリアル計算化学」、機能材料, 21 (2001) 63-69.
- 151) 鈴木 研, 高見誠一, 久保百司, 宮本明, 「コンビナトリアルケミストリー—計算化学的手法との接点」、ペトロテック, 24 (2001) 801-805.
- 152) 鈴木 研, 高見誠一, 久保百司, 宮本明, 「コンビナトリアル計算化学」、工業材料, 50 (2002) 118-119.
- 153) 鈴木 研, 高見誠一, 久保百司, 宮本明, 「コンビナトリアル計算化学」、有機合成化学協会誌, 60 (2002) 488-489.
- 154) 久保百司, 古山通久, 宮本 明, 「コンビナトリアル計算化学」、表面科学, 25 (2004) 690-698.
- 155) 久保百司, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤明, 宮本 明, 「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」、ケミカルエンジニアリング, 51 (2006) 130-138.
- 156) 古山通久, 坪井秀行, 遠藤 明, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明, 「ものづくりのためのマルチスケール・マルチフィジックスコンビナトリアル計算化学」、材料マニュアル, 23 (2006) 20-25.
- 157) 宮本 明, 畠山 望, 鈴木 愛, 三浦隆治, 「コンビナトリアル計算化学の電池材料開発への応用」、高性能リチウムイオン電池開発最前線 5V 級正極材料開発の現状と高エネルギー密度化への挑戦, 第 1 編 高性能蓄電池開発のための基盤研究, 第 5 章 (エヌ・ティー・エス, 2013), pp. 92-103.
- 158) 久保百司, 服部達哉, 鈴木 愛, 古山通久, 坪井秀行, 畠山 望, 遠藤 明, 高羽洋充, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明, 「メタン活性化とその有効利用に関するコンビナトリアルマルチフィジックス、マルチスケール計算化学」、メタン高度化学変換技術集成, 第 5 章 未来型メタン化学変換技術の展開, 第 3 節 (シーエムシー出版, 2008), pp.

357-368.

159) Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, and Akira Miyamoto, “Combinatorial Computational Chemistry Approach for Materials Design: Applications in deNOx Catalysis, Fischer-Tropsch Synthesis, Lanthanoid Complex, and Lithium Ion Secondary Battery”, *Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening*, 10 (2007) 99-110.

160) Ewa Broclawik, Agalya Govindasamy, Changho Jung, Chen Lv, Rado Raharintsalama, Hideyuki Tsuboi, Michihisa Koyama, Momoji Kubo, and Akira Miyamoto, “Combinatorial Computational Chemistry: First Principles Quantum Methods as a Tool for Industrial Innovations”, *Studies in Surface Science and Catalysis*, 159 (2006) 9-16.