

2024 年度スーパーコンピューティングシステム

利用研究成果報告書

(2024 年 4 月～2025 年 3 月)

目 次

『巻頭言』・・・・・・・・・・・・・・・・・・計算材料学センター長 久保百司

I. 研究内容概要

1. A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of α -Fe-C binary system・・・・・・・・・・・・・・・・・・1
Department of Mechanical Science and Bioengineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University Fan-Shun Meng, Shuhei Shinzato, Shihao Zhang, Kazuki Matsubara, Jun-Ping Du, Peijun Yu, Wen-Tong Geng and Shigenobu Ogata
2. 酸素発生反応の計算科学的研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・5
九州大学総合理工学研究院 辻雄太
3. 非層状物質の原子層構造に関する第一原理計算・・・・・・・・・・8
室蘭工業大学 小野頌太
4. 有機半導体固体の構造特性の予測と分析・・・・・・・・・・9
東北大学大学院理学研究科 瀧宮和男、川畑公輔

5.	全電子混合基底法プログラム TOMBO の改良と応用	13
	横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、Mohamad Khazaei マレーシアマラヤ大学 Khian-Hooi Chew 東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov	
6.	変性末端を有するポリイソプレンイン溶融体が形成する構造とレオロジー特性の解明	17
	京都大学大学院工学研究科 Mayank Dixit and Takashi Taniguchi	
7.	潤滑油添加剤由来の反応膜形成の原子スケールモデリング	22
	大阪公立大学大学院工学研究科機械系専攻 桑原卓哉	
8.	第一原理計算に基づいた固体酸化物／液相界面の局所構造解析	25
	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 中山哲	
9.	超伝導状態の第一原理計算方法の開発と応用	28
	東京大学理学系研究科 有田亮太郎	
10.	P2 型ナトリウム系層状酸化物の結晶低アスペクト比化に向けた結晶形状状態図の作成	30
	信州大学先鋭材料研究所 宮川博夫、山田哲也、手嶋勝弥	
11.	原子論的シミュレーションによる軽合金の力学特性に及ぼすナノ析出物の影響の評価	32
	名古屋大学工学研究科 君塚肇	
12.	Experimental and computational studies on chemical reactions involving metal and metal-oxide clusters	35
	九州大学大学院理学研究院 荒川雅、寺寄亨 東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov	
13.	プロトン伝導性有機結晶中のプロトン移動と分子運動の解析	38
	筑波大学計算科学研究センター 堀優太、渡辺七都稀、岡澤一樹	
14.	Charged Defects in Halide Perovskites	40
	Kyushu University Qing Wang and Satoshi Iikubo	

15. 高分子と金属材料の接着に関するマルチスケールシミュレーション技法の構築	42
防衛大学校応用物理学科 萩田克美	
東北大学多元物質科学研究所 宮田智衆、陣内浩司	
東北大学理学研究科 村島隆浩	
16. 超微細金属酸化物ナノ粒子の特異な構造物性に関するクラスター計算	45
名古屋大学大学院工学研究科 高見誠一	
東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター 横哲	
17. 多元素ナノ合金創製のための大規模安定性データの創出	48
信州大学先鋭材料研究所 古山通久	
18. 分子動力学法とメソスケールモデルの協働による分岐高分子のレオロジー解析	51
金沢大学設計製造技術研究所 佐藤健	
19. Vacancy formation at ferrite/cementite interface	54
Yokohama National University K. Kato, A. Fujii and H. Raebiger	
20. Theoretical Study on the Stability of Hydrogen Insertion in $\text{Sr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)\text{O}_y$	56
Graduate School of Engineering, Osaka University Thanh Ngoc Pham and Yoshitada Morikawa	
21. Exploration of High Entropy Cathode Material for Lithium-Ion Battery	65
Shinshu University K. Hisama, T. Q. Nguyen, A. Toborosi, N. Zettsu and M. Koyama	
22. 強磁性体の第一原理磁歪計算	68
東京理科大学研究推進機構総合研究院 山崎貴大	
23. 大規模分子動力学計算に向けたボンドオーダーに基づく機械学習原子間ポテンシャルの開発	70
東京大学工学系研究科機械工学専攻 小幡郁真、丸山茂夫	

24. アモルファス合金の変形プロセスの 4D-STEM 実験と結合した MD シミュレーション 73
島根大学次世代たたら協創センター 荒河一渡
大阪大学大学院基礎工学研究科 尾方成信、新里秀平
東北大学金属材料研究所 久保百司
25. Ti-HAp 界面におけるフレッティング摩耗挙動の分子動力学解析 75
長岡技術科学大学 Pham Ding Dat、Yuichi Otsuka
26. 高水素配位錯体水素化物におけるマグネシウムイオン輸送特性 77
量子科学技術研究開発機構 高木成幸
27. キチン膜中の水分子の揺らぎによって生じるプロトン移動 79
東北大学大学院理学研究科 高橋まさえ
28. Design and Understanding of the Activity and Stability of Promising Electrocatalysis
via Precise Catalysis Theory and AI 81
Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University Hao Li
29. Dealing with the big data challenges in AI for thermoelectric materials 86
Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University Xue Jia,
Qiuling Jiang and Yuhang Wang
30. ワニエ関数を用いた第一原理計算手法の開発 91
東北大学理学研究科 是常隆
31. TOMBO-TDGW 法による触媒下に於けるメタン分子からの水素発生過程追跡 .. 93
東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
韓国科学技術研究所 水関博志
物質材料研究機構 佐原亮二、Manjunath Aaditya
横浜国立大学 大野かおる
University of Malaya Lee Vannajan
The University of Dannon Viet Bui

32. Spin Promotion Effect in Magnetic Catalysis: Exploring High-Performance Metal-Nitrogen-Carbon Catalysts under External Magnetic Fields 99
Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University Di Zhang,
Wang Yong and Heng Liu
33. 分子・粒子スケールシミュレーションによる有機修飾無機固体／高分子界面の親和性評価106
東北大学大学院工学研究科 久保正樹、斎藤高雅、佐藤悠都、久保百司
34. 高色純度熱活性化遅延蛍光性トリアリールボラン：スピナー軌道相互作用の行列要素に着目した逆項間交差の高速化 111
東北大学大学院工学研究科 北本雄一
35. 水素貯蔵材料の熱伝導率予測 116
東北大学材料科学高等研究所 三輪和利
36. Investigation on Grain Boundary Structures and the Effect of Impurity Segregation .. 119
Tohoku University Qian Chen
37. 多価カチオン塩添加を利用したリチウム金属負極の析出平坦化と界面安定性向上121
東北大学金属材料研究所 李弘毅、市坪哲
38. 材料表面・粒界における点欠陥の理論計算123
東北大学金属材料研究所 清原慎、ベ ソンミン、宮本伊武己、熊谷悠
39. 電子ビーム積層造形プロセスのデジタルツイン開発126
東北大学金属材料研究所 青柳健大
40. 酸化物核燃料のニューラルネットワークポテンシャルの開発130
東北大学金属材料研究所 小無健司、松尾悟
41. 高いイオン伝導度を実現するための、Mg 系正極材料の物質設計134
東北大学金属材料研究所 Seong-Hoon Jang

42. 第一原理計算による二次元物質の不純物ドーピングの設計136
 東北大学金属材料研究所 Soungmin Bae
43. 有機 EL の省エネルギー製造を実現する新規抵抗加熱合金の循環利用可能性
 の検討138
 東北大学金属材料研究所 Rikito Murakami and Kotaro Yonemura
44. ノンパラメータマルチスケール計算による構造・機能材料設計143
 物質材料研究機構 佐原亮二、A. Saengdeejing、A. Manjanaath
 韓国科学技術研究院、水関博志
 Indian Institute of Science A. Kr. Singh
 Brunel University London S. Swetlana、M. Souissi
 Indian Institute of Science Education and Research Pune P. Ghosh、P. Chame
 東京大学 根上奨大
 東北大学 中島知紀、和田知己、伊藤七奈
45. 第一原理計算を用いた磁歪定数の符号に及ぼすスピン-軌道相互作用の影響
 の解明148
 東北大学金属材料研究所 梅津理恵
46. 第一原理計算と実験の共同による新規有機金属構造体探索153
 東北大学未来科学技術共同研究センター 長坂徹也
47. STRUCTURAL DESIGN AND THERMODYNAMIC STABILITY EVALUATION
 OF NEW FUNCTIONAL NANOMATERIALS158
 Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov

48. Understanding materials insights and exploring new materials using first-principles approaches combining machine learning 162
Tohoku University Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Meng Yin,
Chaonan Xu, Xuguang Zheng, Tomoki Uchiyama, Koki Otonari
Bangor University, UK and Tohoku University Theresa Davey
Beijing University of Science and Technology, China and Tohoku University
Lei Wang
Shanghai University, China Hao Wang
Institute of Fluid Physics, China Hua Y. Gneg
NIMTE, Chinese Academy of Sciences, China Hubin Luo
49. Anomalous thermal transport properties of two-dimensional materials on substrate using machine learning potential 168
Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo
Junichiro Shiomi
50. 第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースと予測モデルの構築...170
統計数理研究所 大西正人
51. 大規模分子動力学シミュレーションを活用したスケール協奏現象の解明に
基づくナノ・メゾ・マクロの仕掛けの設計 174
東北大学金属材料研究所 尾澤伸樹、大谷優介、福島省吾、蘇怡心、
許競翔、高橋昭、中村美穂、渡辺瑛奈子、竹本有紀、川浦正之、
趙コウヨ、横井瑞穂、中村哲也、細野賢人、中島快、森海斗、東澤卓弥、
渡部恵秋、鈴木千尋、久保百司
52. 複雑系に対するマルチスケールアプローチ、及びマテリアルズ・インテグ
レーションによる物性研究と材料科学分野の高等教育に対する応用 III..... 178
東北大学金属材料研究所 寺田弥生
Universidade Federal Fluminense, Brazil Paulo Rios, Assis Wesley,
Alves Celso
ICMPE, France Jean-Claude Crivello
Korea Institute of Materials Science, Korea Eun-Ae Choi
53. 理論計算化学による触媒反応メカニズムの解析 183
北海道大学触媒科学研究所 宮崎玲

54. セラミックス材料の強度評価のための FE2 シミュレーション手法の開発……186
横浜国立大学大学院環境情報研究院 松井和己、杉山弘輝、南大地
55. 異種金属ドーパ酸素還元用カーボン触媒の開発 ……………190
近畿大学理工学部 朝倉博行
56. Effect of trapped C and N on the oxidation of stainless steel…………192
National Institute of Technology, Sendai College Das Nishith (田須ニシス)
57. エネルギー変換を指向した分子性機能性材料の探索 ……………195
東北大学理学研究科化学専攻 豊田良順
58. 有機無機ペロブスカイト薄膜の形成過程における振動スペクトルの解析 ……197
東北大学大学院工学研究科 丸山伸伍
59. GW 近似計算によるシンチレータ用新規材料探索 ……………199
東北大学金属材料研究所 吉川彰
60. Hydrogen and vacancy concentrations in α -iron under high hydrogen gas pressure
and external stress: A first-principles neural network simulation study…………203
Osaka University Shihao Zhang, Shihao Zhu, Fanshun Meng and
Shigenobu Ogata
61. リチウムイオン電池正極活物質内の Li 拡散特性検討 ……………206
プライムアース EV エナジー株式会社 (現社名：トヨタバッテリー株式会社)
椎葉寛将、原健治朗、中桐康司

II. 原著論文

<2024 年>

1. Response to VOCs stimuli by triphenylamine derivatives functionalized zinc oxide nanorods: A promising material for food freshness monitoring
Surf. Interfaces, 44 (2024) Art.No.103648
Gobinath Marappan, Abdul Kaium Mia, Kishore Puspharaj,
Sivakumar Vaidyanathan, Yoshiyuki Kawazoe, Yuvaraj Sivalingam and
Velappa Jayaraman Surya
<https://doi.org/10.1016/j.surfin.2023.103648>
2. Adsorption behavior of atmospheric CO₂ with/without water vapor on CeO₂ surface
Appl. Catal., B, 343 (2024) Art.No.123538
Masato Akatsuka, Akira Nakayama and Masazumi Tamura
<https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2023.123538>
3. A quantum chemical assessment on the sensing ability of porphyrins and phthalocyanines towards volatile organic compounds using density functional theory investigations
Mol. Syst. Des. Eng., 9[3] (2024) pp.286-299
Rence Painappallil Reji, Yuvaraj Sivalingam, Yoshiyuki Kawazoe and
Surya Velappa Jayaraman
<https://doi.org/10.1039/D3ME00175J>
4. Formal description of the initial propagation of martensite and the martensitic spread
Mater. Sci. Technol., 40[11] (2024) Art.No.844-850
José Roberto C. Guimarães, Paulo R. Rios and André Luiz M. Alves
<https://doi.org/10.1177/02670836241228052>
5. 光相変化材料としての応用へ向けたカルコゲナイド化合物の超高速光応答
まてりあ, 63[2] (2024) pp.87-94
谷村洋、河口智也、岡本範彦、市坪哲
<https://doi.org/10.2320/materia.63.87>

6. Electron-capture decay rate of ^7Be in cluster and crystal forms of beryllium: A first-principles study
Phys. Rev. C, 109 (2024) Art.No.024609
Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno and Tsutomu Ohtsuki
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.109.024609>
7. Reactive Molecular Dynamics Simulation Study on Atomic-Scale Adhesive Wear Mechanisms of Single Crystalline Body-Centered Cubic Iron
Tribol. Lett., 72 (2024) Art.No.35
Yusuke Ootani, Masaki Tsuchiko, Masayuki Kawaura, Mizuho Yokoi, Qian Chen, Yuta Asano, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
<https://doi.org/10.1007/s11249-024-01834-8>
8. Dealing with the big data challenges in AI for thermoelectric materials
Sci. China Mater., 67[4] (2024) pp.1173-1182
Xue Jia, Alex Aziz, Yusuke Hashimoto and Hao Li
<https://doi.org/10.1007/s40843-023-2777-2>
9. Topological and superconducting properties of two-dimensional $\text{C}_{6-2x}(\text{BN})_x$ biphenylene network: First-principles investigation
Phys. Rev. B, 109 (2024) Art.No.125424
Guang F. Yang, Hong X. Song, Dan Wang, Hao Wang and Hua Y. Geng
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.125424>
10. Long-range proton and hydroxide ion transfer dynamics at the water/ CeO_2 interface in the nanosecond regime: reactive molecular dynamics simulations and kinetic analysis
Chem. Sci., 15[18] (2024) pp.6816-6832
Taro Kobayashi, Tatsushi Ikeda and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1039/D4SC01422G>
11. Impact evaluation of amount of burnt lime, moisture and pellet feed on the sinter fines fraction by utilizing a sintering pilot plant
Tecnol. Metal. Mater. Min., 21 (2024) Art.No.e3037
Celso Luiz Moraes Alves, Ana Carolina Castro Barboza da Silva, Sara Santos Silva, Arnaldo Ledig Aguiar Silva and José Adilson de Castro
<https://doi.org/10.4322/2176-1523.20243037>

12. Rational Design of Cost-Effective Metal-Doped ZrO₂ for Oxygen Evolution Reaction
Nano-Micro Lett., 16 (2024) Art.No.180
Yuefeng Zhang, Tianyi Wang, Liang Mei, Ruijie Yang, Weiwei Guo, Hao Li and
Zhiyuan Zeng
<https://doi.org/10.1007/s40820-024-01403-7>
13. Picturing the Gap Between the Performance and US-DOE's Hydrogen Storage Target: A
Data-Driven Model for MgH₂ Dehydrogenation
Angew. Chem. Int. Ed., 63[28] (2024) Art.No.e202320151
Chaoqun Li, Weijie Yang, Hao Liu, Xinyuan Liu, Xiuqing Xing, Zhengyang Gao,
Shuai Dong and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/anie.202320151>
14. Utilization of Delithiation-Induced Amorphous Oxide as a Cathode for Rechargeable
Magnesium Batteries
Chem. Mater., 36[9] (2024) pp.4877-4887
Tomoya Kawaguchi, Natsumi Nemoto, Hikari Sakurai, Norihiko L. Okamoto and
Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c01056>
15. Reaction of size-selected iron-oxide cluster cations with methane: a model study of rapid
methane loss in Mars' atmosphere
Phys. Chem. Chem. Phys., 26[20] (2024) pp.14684-14690
Masashi Arakawa, Satoshi Kono, Yasuhito Sekine and Akira Terasaki
<https://doi.org/10.1039/D4CP01337A>
16. Why is neutral tin addition necessary for biocompatible β -titanium alloys?—Synergistic
effects of suppressing ω transformations
Acta Mater., 273 (2024) Art.No.119968
Norihiko L. Okamoto, Florian Brumbauer, Martin Luckabauer, Wolfgang Sprengel,
Ryota Abe and Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2024.119968>

17. The potential of zero charge and solvation effects on single-atom M–N–C catalysts for oxygen electrocatalysis
J. Mater. Chem. A, 12[23] (2024) pp.13742-13750
Di Zhang and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D4TA02285H>

18. Coarse-grained molecular dynamics model of AB diblock copolymers composed of blocks with different Lennard-Jones parameters forming lamellar structures
Polymer, 304 (2024) Art.No.127132
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
<https://doi.org/10.1016/j.polymer.2024.127132>

19. Machine Learning in Catalysis: Analysis and Prediction of CO Adsorption on Multi-elemental Nanoparticle using Metal Coordination-based Regression Model
J. Comput. Chem. Jpn., 23[1] (2024) pp.19-23
Susan Menez Aspera, Gerardo Valadez Huerta, Yusuke Nanba, Kaoru Hisama and Michihisa Koyama
<https://doi.org/10.2477/jccj.2024-0006>

20. Non-adiabatic excited-state time-dependent GW molecular dynamics (TD GW) satisfying extended Koopmans' theorem: An accurate description of methane photolysis
J. Chem. Phys., 160 (2024) Art.No.184102
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1063/5.0202590>

21. Atomistic modeling of nucleation kinetics of Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys: Two formation scenarios and prediction of the time-temperature-transformation diagram
Comput. Mater. Sci., 242 (2024) Art.No.113069
Heting Liao, Hajime Kimizuka, Hiroshi Miyoshi and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113069>

22. Highly Dispersed Ni Atoms and O₃ Promote Room-Temperature Catalytic Oxidation
ACS Nano, 18[21] (2024) pp.13568-13582
Ruijie Yang, Wanjian Zhang, Yuefeng Zhang, Yingying Fan, Rongshu Zhu,
Jian Jiang, Liang Mei, Zhaoyong Ren, Xiao He, Jinguang Hu, Zhangxin Chen,
Qingye Lu, Jiang Zhou, Haifeng Xiong, Hao Li, Xiao Cheng Zeng and Zhiyuan Zeng
<https://doi.org/10.1021/acsnano.3c12946>
23. Exploring the Role of Hydroxy- and Phosphate-Terminated cis-1,4-Polyisoprene Chains
in the Formation of Physical Junction Points in Natural Rubber: Insights from Molecular
Dynamics Simulations
ACS Polym. Au, 4[4] (2024) pp.273-288
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1021/acspolymersau.4c00019>
24. Coarse-grained molecular dynamics model of conformationally asymmetric AB diblock
copolymers forming lamellar structures
Comput. Mater. Sci., 243 (2024) Art.No.113105
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113105>
25. On-the-fly kinetic Monte Carlo simulations with neural network potentials for surface
diffusion and reaction
J. Chem. Phys., 160[20] (2024) Art.No.204108
Tomoko Yokaichiya, Tatsushi Ikeda, Koki Muraoka and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1063/5.0199240>
26. Origin of the Activity of Electrochemical Ozone Production Over Rutile PbO₂ Surfaces
ChemSusChem, 17[21] (2024) Art.No.e202400827
Jin-Tao Jiang, Zhongyuan Guo, Shao-Kang Deng, Xue Jia, Heng Liu, Jiang Xu,
Hao Li and Li-Hua Cheng
<https://doi.org/10.1002/cssc.202400827>

27. 2D and 3D Microstructural Reconstruction of Nodular Cast Iron
Mat. Res., 27 (2024) Art.No.e20230405
Caio Costa Abrantes Ferreira, André Luiz Moraes Alves, Wesley Luiz da Silva Assis
and Paulo Rangel Rios
<https://doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2023-0405>

28. High Adsorption Affinity of Indole in Defective UiO-66 Metal–Organic Frameworks: A First-Principles Study
Adv. Theor. Simul., 7[8] (2024) Art.No.2400110
Thong Nguyen-Minh Le, Phat Tan Nguyen, Trang Thuy Nguyen,
Linh Ho Thuy Nguyen, Tan Le Hoang Doan, Thang Bach Phan, Yoshiyuki Kawazoe
and Duc Manh Nguyen
<https://doi.org/10.1002/adts.202400110>

29. Mapping Degradation of Iron-Nitrogen-Carbon Heterogeneous Molecular Catalysts with Electron-Donating/Withdrawing Substituents
ACS Catal., 14[12] (2024) pp.9176-9187
Fangzhou Liu, Di Zhang, Fangxin She, Zixun Yu, Leo Lai, Hao Li, Li Wei and
Yuan Chen
<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c01752>

30. Room-temperature pressure-induced phase separation in glassy alloys
Mater. Today Commun., 40 (2024) Art.No.109453
D.V. Louzguine-Luzgin, R.V. Belosludov and M.I. Ojovan
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2024.109453>

31. シミュレーションを用いた DLC と潤滑油添加剤のトライボケミストリーの研究
月刊トライボロジー, 6[442] (2024) pp.48-53
桑原卓哉
<https://tribology.press-shinjusha.co.jp/backnumber2024/>

32. Atomic rare earths activate direct O-O coupling in manganese oxide towards electrocatalytic oxygen evolution
Nano Energy, 128 (2024) Art.No.109868
Meng Li, Xuan Wang, Di Zhang, Yujie Huang, Yijie Shen, Fei Pan, Jiaqi Lin, Wei Yan, Dongmei Sun, Kai Huang, Yawen Tang, Jong-Min Lee, Hao Li and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2024.109868>
33. Oxophilic Tm-Sites in MoS₂ Trigger Thermodynamic Spontaneous Water Dissociation for Enhanced Hydrogen Evolution
Adv. Energy Mater., 14[35] (2024) Art.No.2401716
Meng Li, Xuan Wang, Han Du, Wenrou Dong, Songbo Ye, Heng Liu, Huamei Sun, Kai Huang, Hao Li, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/aenm.202401716>
34. Statistical analysis model of a proton exchange membrane fuel cell
Cadernos UniFOA, 19[54] (2024) pp.1-19
Fábio José Bento Brum, Thiago José Cyrne Moreno and Wesley Luiz da Silva Assis
<https://doi.org/10.47385/cadunifoa.v19.n54.4806>
35. Anisotropic Thermal Conductivity Enhancement of the Aligned Metal–Organic Framework under Water Vapor Adsorption
J. Phys. Chem. Lett., 15[25] (2024) pp.6628-6633
Shingi Yamaguchi, Issei Tsunekawa, Makito Furuta, Chirag Anilkumar, Yuxuan Liao, Takuma Shiga, Takashi Kodama and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.4c01244>
36. Anharmonicity in negative thermal expansion materials ZrW₂O₈ and ZrV₂O₇: Three-phonon interactions
Phys. Lett. A, 517 (2024) Art.No.129667
Lei Wang, Ya-Ning Sun, Zhi-Hao Yao, Ying Chen and Cong Wang
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129667>

37. Insight into Facile Ion Diffusion in Resistive Switching Medium toward Low Operating Voltage Memory
Nano Lett., 24[26] (2024) pp.7999-8007
Dinh Phuc Do, Viet Q. Bui, Minh Chien Nguyen, Sohyeon Seo, Van Dam Do, Joosung Kim, Jungsue Choi, Hyun Ko, Woo Jong Yu, Yoshiyuki Kawazoe and Hyoyoung Lee
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c01629>
38. In-Plane Sliding Ferroelectricity Realized in Penta-PdSe₂/Penta-PtSe₂ van der Waals Heterostructure
ACS Nano, 18[26] (2024) pp.16923-16933
Changsheng Hou, Yiheng Shen, Qian Wang, Akira Yoshikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
<https://doi.org/10.1021/acsnano.4c02994>
39. Beyond metals: theoretical discovery of semiconducting MAX phases and their potential application in thermoelectrics
Phys. Chem. Chem. Phys., 26[27] (2024) pp.18907-18917
Mohammad Khazaei, Iraj Shahrivari Maleki, Namitha Anna Koshi, Ahmad Ranjbar, Nanxi Miao, Junjie Wang, Rasoul Khaledialidusti, Thomas D. Kühne, Seung Cheol Lee, Satadeep Bhattacharjee, Hamid Hosano, S. Mehdi Vaez Allaei, Keivan Esfarjani and Kaoru Ohno
<https://doi.org/10.1039/D4CP01950D>
40. Effects of Surfactants on the Size Distribution and Electrocatalytic Nitrite Reduction of Uniformly Dispersed Au Nanoparticles
ACS Sustainable Chem. Eng., 12[28] (2024) pp.10313-10324
Wei Zhang, Tianyi Wang, Xiuqing Xing, Huhu Yin, Jin Li, Wei Xiong and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c07687>
41. トライボケミストリーに関する分子シミュレーション
アンサンブル, 26[3] (2024) pp.263-268
桑原卓哉

42. Light-driven C–H activation mediated by 2D transition metal dichalcogenides
Nat. Commun., 15 (2024) Art.No.5546
Jingang Li, Di Zhang, Zhongyuan Guo, Zhihan Chen, Xi Jiang, Jonathan M. Larson, Haoyue Zhu, Tianyi Zhang, Yuqian Gu, Brian W. Blankenship, Min Chen, Zilong Wu, Suichu Huang, Robert Kostecki, Andrew M. Minor, Costas P. Grigoropoulos, Deji Akinwande, Mauricio Terrones, Joan M. Redwing, Hao Li and Yuebing Zheng
<https://doi.org/10.1038/s41467-024-49783-z>
43. Europium Oxide Evoked Multisite Synergism to Facilitate Water Dissociation for Alkaline Hydrogen Evolution
Adv. Funct. Mater., 34[49] (2024) Art.No.2409324
Yu Zhu, Xiangrui Wu, Zixin Wu, Xu Wang, Xuan Wang, Caikang Wang, Xiaoheng Zhu, Meng Li, Dongmei Sun, Hao Li, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/adfm.202409324>
44. Quinoidal π -extension of dipyranylidene derivatives: towards efficient dopants for n-type organic semiconductors
Org. Chem. Front., 11[17] (2024) pp.4682-4688
Takaya Matsuo, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1039/D4QO00961D>
45. Curvature-Dependent Electrochemical Hydrogen Peroxide Synthesis Performance of Oxidized Carbon Nanotubes
ACS Catal., 14[14] (2024) pp.10928-10938
Fangxin She, Zhongyuan Guo, Fangzhou Liu, Zixun Yu, Jiaxiang Chen, Yameng Fan, Yaojie Lei, Yuan Chen, Hao Li and Li Wei
<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c01637>
46. First-Principles Calculation of Elastic Properties in $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}:\text{Nd}^{3+}$ Mechanoluminescence Material
Adv. Theor. Simul., 7[9] (2024) Art.No.2400099
Soichiro Kawana, Kenji Hirata, Yuki Fujio, Tomoki Uchiyama and Chao-Nan Xu
<https://doi.org/10.1002/adts.202400099>

47. Structural, electronic, magnetic, and thermoelectric properties of half Heusler alloys $\text{ZrCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Sb}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$): A DFT study
Solid State Sci., 154 (2024) Art.No.107627
R. Meenakshi, R. Aram Senthil Srinivasan, A. Amudhavalli, K. Iyakutti, Y. Kawazoe and R. Rajeswara Palanichamy
<https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2024.107627>
48. Neural network molecular dynamics simulation on friction-induced chemical reactions of Si_3N_4 in water and ethylene glycol environments
Chem. Lett., 53[7] (2024) Art.No.114
Ryutaro Kudo, Yusuke Ootani, Shogo Fukushima, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
<https://doi.org/10.1093/chemle/upae114>
49. Electrostatic gating tuned electronic, interfacial, and optical properties of an all-carbon penta-graphene/biphenylene network vdW heterostructure
Comput. Mater. Sci., 244 (2024) Art.No.113228
Muhammad Azhar Nazir, Yiheng Shen, Changsheng Hou, Chenxin Zhang, Qian Wang, Akira Yoshikawa and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113228>
50. Generating highly active oxide-phosphide heterostructure through interfacial engineering to break the energy scaling relation toward urea-assisted natural seawater electrolysis
J. Energy Chem., 97 (2024) pp.687-699
Ngoc Quang Tran, Nam Hoang Vu, Jianmin Yu, Khanh Vy Pham Nguyen, Thuy Tien Nguyen Tran, Thuy-Kieu Truong, Lishan Peng, Thi Anh Le and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1016/j.jechem.2024.07.010>

51. Chemical Trends of the Bulk and Surface Termination-Dependent Electronic Structure of Metal-Intercalated Transition Metal Dichalcogenides
Chem. Mater., 36[15] (2024) pp.7117-7126
Brendan Edwards, Darius-A. Deaconu, Philip A. E. Murgatroyd,
Sebastian Buchberger, Tommaso Antonelli, Daniel Halliday, Gesa-R. Siemann,
Andela Zivanovic, Liam Trzaska, Akhil Rajan, Edgar Abarca Morales,
Daniel A. Mayoh, Amelia E. Hall, Rodion V. Belosludov, Matthew D. Watson,
Timur K. Kim, Deepnarayan Biswas, Tien-Lin Lee, Craig M. Polley, Dina Carbone,
Mats Leandersson, Geetha Balakrishnan, Mohammad Saeed Bahramy and
Phil D. C. King
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c00824>
52. Efficient calculation of magnetocrystalline anisotropy energy using symmetry-adapted Wannier functions
Comput. Phys. Commun., 305 (2024) Art.No.109325
Hiroto Saito and Takashi Koretsune
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109325>
53. Effect of reactive elements in MCrAlX bond coat for durability improvement of thermal barrier coatings
Corros. Sci., 237 (2024) Art.No.112329
Masahiro Negami, Ryo Morihashi, Tessei Yoshino, Ryoji Sahara and
Yoko Yamabe-Mitarai
<https://doi.org/10.1016/j.corsci.2024.112329>
54. Facet-Dependent Evolution of Active Components on Spinel Co₃O₄ for Electrochemical Ammonia Synthesis
ACS Nano, 18[33] (2024) pp.22344-22355
Anquan Zhu, Heng Liu, Shuyu Bu, Kai Liu, Chuhao Luan, Dewu Lin,
Guoqiang Gan, Yin Zhou, Tian Zhang, Kunlun Liu, Guo Hong, Hao Li and
Wenjun Zhang
<https://doi.org/10.1021/acsnano.4c06637>

55. A Metal–Sulfur–Carbon Catalyst Mimicking the Two-Component Architecture of Nitrogenase
Angew. Chem. Int. Ed., 63[45] (2024) Art.No.e202412740
Junkai Xia, Jiawei Xu, Bing Yu, Xiao Liang, Zhen Qiu, Hao Li, Huajun Feng, Yongfu Li, Yanjiang Cai, Haiyan Wei, Haitao Li, Hai Xiang, Zechao Zhuang and Dingsheng Wang
<https://doi.org/10.1002/anie.202412740>
56. Surface Structure Reformulation from CuO to Cu/Cu(OH)₂ for Highly Efficient Nitrate Reduction to Ammonia
Adv. Sci., 11[38] (2024) Art.No.2404194
Jin Li, Qiuling Jiang, Xiuqing Xing, Cuilian Sun, Ying Wang, Zhijian Wu, Wei Xiong and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/advs.202404194>
57. Interaction of H, H₂, and MgH₂ With Graphene and Possible Application to Hydrogen Storage—A Density Functional Computational Investigation
Int. J. Quantum Chem., 124[16] (2024) Art.No.e27467
K. Iyakutti, Rence P. Reji, K. Ajaijawahar, I. Lakshmi, R. Rajeswarapalanichamy, V. J. Surya, A. Karthigeyan and Y. Kawazoe
<https://doi.org/10.1002/qua.27467>
58. Acid-Base Bifunctional Catalysis of the Lewis Acidic Isolated Co(OH)₂ and Basic N Anion Generated from CeO₂ and 2-Cyanopyridine
ACS Catal., 14[17] (2024) pp.13015-13029
Masazumi Tamura, Miyu Haga, Anchalee Junkaew, Daiki Asada, Rise Ichikawa, Ryo Toyoshima, Akira Nakayama, Hiroshi Kondoh, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige
<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c02378>
59. Introducing Noble Gas as Space Holder under High Pressure to Design Porous Titanium Carbides with Open Metal Sites for Hydrogen Storage at Near-Ambient Conditions
J. Am. Chem. Soc., 146[35] (2024) pp.24553-24560
Jiewei Cheng, Ahmed H. Ati, Yoshiyuki Kawazoe and Qiang Sun
<https://doi.org/10.1021/jacs.4c07772>

60. DFT study of the electronic, optical and elastic properties of $\text{Cu}_{2-x}\text{Ag}_x\text{MgSnS}_4$ ($x=0, 0.5, 1, 1.5, 2$) alloys using TB-mBJ+U potential
Comput. Condens. Matter, 41 (2024) Art.No.e00956
R. Aram Senthil Srinivasan, R. Meenakshi, A. Amudhavalli,
R. Rajeswara Palanichamy, K. Iyakutti and Y. Kawazoe
<https://doi.org/10.1016/j.cocom.2024.e00956>
61. Investigation of the role of Ni addition in nano-crystallization of Fe-based amorphous alloys
J. Alloys Compd., 1005 (2024) Art.No.176172
Xuanyuan Zhang, Xiaoying Huang, Yunwu Liang, Yuanfei Cai, Yanan Chen,
Meng Gao, Yoshiyuki Kawazoe, Rie Umetsu, Mingliang Xiang, Xiaojun Zhao,
Yaocen Wang, Junqiang Wang and Yan Zhang
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2024.176172>
62. Facilitation of Pd-Ru Mixing in Nanoalloys of Immiscible Palladium and Ruthenium by NO Adsorption
J. Phys. Chem. C, 128[36] (2024) pp.14937-14946
Yusuke Nanba, Masaaki Haneda and Michihisa Koyama
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c03350>
63. Data-driven design of high-curie temperature full-heusler alloys for spintronic applications
Mater. Today Phys., 47 (2024) Art.No.101541
Quynh Anh T. Nguyen, Thi H. Ho, Tran Bao Tien, Yoshiyuki Kawazoe and
Viet Q. Bui
<https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2024.101541>
64. Mitigating ZrCr_2 formation at the Cr/Zr interface through trace doping of Zn, Mg and Sn into Cr coatings: A combined first-principles computational and experimental investigation
J. Nucl. Mater., 603 (2025) Art.No.155375
Bo Li, Theresa Davey, Huilong Yang, John Andrew Kane Jovellana, Sho Kano,
Ying Chen and Hiroaki Abe
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2024.155375>

65. Chromium Promotes Phase Transformation to Active Oxyhydroxide for Efficient Oxygen Evolution
ACS Catal., 14[18] (2024) pp.13759-13767
Yong Wang, Sijia Liu, Yunpu Qin, Yongzhi Zhao, Luan Liu, Di Zhang, Jianfang Liu, Yadong Liu, Aimin Chu, Haoyang Wu, Baorui Jia, Xuanhui Qu, Hao Li and Mingli Qin
<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c03974>
66. Identifying Highly Active and Selective Cobalt X-Idees for Electrocatalytic Hydrogenation of Quinoline
Adv. Mater., 36[41] (2024) Art.No.2411090
Han Du, Tianyi Wang, Meng Li, Zitong Yin, Ransheng Lv, Muzhe Zhang, Xiangrui Wu, Yawen Tang, Hao Li and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/adma.202411090>
67. Carbon and boron nitride quantum dots as optical sensor probes for selective detection of toxic metals in drinking water: a quantum chemical prediction through structure- and morphology-dependent electronic and optical properties
RSC Adv., 14[38] (2024) pp.28182-28200
Chedharla Balaji Sarath Kumar, Rence Painappallil Reji, Yuvaraj Sivalingam, Yoshiyuki Kawazoe and Velappa Jayaraman Surya
<https://doi.org/10.1039/D4RA04843A>
68. Element-specific descriptors to predict the stability of binary nanoalloys
Comput. Mater. Sci., 246 (2024) Art.No.113336
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113336>
69. Er-Doping Enhances the Oxygen Evolution Performance of Cobalt Oxide in Acidic Medium
ACS Catal., 14[18] (2024) pp.13814-13824
Sanjiang Pan, Hang Li, Tianyi Wang, Yang Fu, Shenao Wang, Zishuo Xie, Li Wei, Hao Li and Nan Li
<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c03088>

70. A Molecular Dynamics Study of the Influence of Low-Dosage Methanol on Hydrate Formation in Seawater and Pure Water Metastable Solutions of Methane
J. Mar. Sci. Eng., 12[9] (2024) Art.No.1626
Rodion V. Belosludov, Kirill V. Gets, Ravil K. Zhdanov, Yulia Y. Bozhko and Vladimir R. Belosludov
<https://doi.org/10.3390/jmse12091626>
71. Spin Manipulation of Heterogeneous Molecular Electrocatalysts by an Integrated Magnetic Field for Efficient Oxygen Redox Reactions
Adv. Mater., 36[45] (2024) Art.No.2408461
Zixun Yu, Di Zhang, Yangyang Wang, Fangzhou Liu, Fangxin She, Jiaxiang Chen, Yuefeng Zhang, Ruijie Wang, Zhiyuan Zeng, Li Song, Yuan Chen, Hao Li and Li Wei
<https://doi.org/10.1002/adma.202408461>
72. A DFT Mechanistic Study on the Aza-Aldol Reaction of Boron Aza-Enolates: Relative Stability of Six-Membered Transition State and Its Relevance to the Coordination Mode of the Leaving Group
J. Org. Chem., 89[19] (2024) pp.13913-13922
Sho Miyakawa, Ray Miyazaki, Tomoya Miura and Jun-ya Hasegawa
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.4c00957>
73. Fluorite-type materials in the monolayer limit
Phys. Rev. Mater., 8 (2024) Art.No.094002
Shota Ono and Ravinder Pawar
<https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.8.094002>
74. A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of α -Fe-C binary system
Acta Mater., 281 (2024) Art.No.120408
Fan-Shun Meng, Shuhei Shinzato, Shihao Zhang, Kazuki Matsubara, Jun-Ping Du, Peijun Yu, Wen-Tong Geng and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2024.120408>

75. Exploring Electrolyte Adsorption on the Different Types of Layered Cathode Surfaces in Lithium-Ion Batteries via a Universal Neural Network Potential Method
ACS Omega, 9[41] (2024) pp.42116-42126
Attila Taborosi, Hiromasa Shiiba, Michihisa Koyama and Nobuyuki Zettsu
<https://doi.org/10.1021/acsomega.4c02484>
76. Hydrogen and vacancy concentrations in α -iron under high hydrogen gas pressure and external stress: A first-principles neural network simulation study
Int. J. Hydrogen Energy, 90 (2024) pp.246-256
Shihao Zhang, Shihao Zhu, Fanshun Meng and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.09.378>
77. Valley-Polarized Topological Phases with In-Plane Magnetization
Nano Lett., 24[42] (2024) pp.13213-13218
Ranjan Kumar Barik, Subhendu Mishra, Mohammad Khazaei, Shiyao Wang, Yunye Liang, Yan Sun, Ahmad Ranjbar, Teck Leong Tan, Junjie Wang, Seiji Yunoki, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Abhishek K. Singh
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c03252>
78. All-electron first-principles *GWT* simulations for accurately predicting core-electron binding energies considering first-order three-point vertex corrections
J. Chem. Phys., 161[15] (2024) Art.No.154102
Kenta Yoneyama, Yoshifumi Noguchi and Kaoru Ohno
<https://doi.org/10.1063/5.0227580>
79. Vibrational frequencies utilized for the assessment of exchange-correlation functionals in the description of metal-adsorbate systems: C₂H₂ and C₂H₄ on transition-metal surfaces
Catal. Sci. Technol., 14[23] (2024) pp.6924-6933
Ray Miyazaki, Somayeh Faraji, Sergey V. Levchenko, Lucas Foppa and Matthias Scheffler
<https://doi.org/10.1039/D4CY00685B>

80. Enhancing the Thermoelectric Performance of Si-Based Clathrates via Carrier Optimization Considering Finite Temperature Effects
Chem. Mater., 36[21] (2024) pp.10595-10604
Masato Ohnishi, Takahiro Yamamoto, Koji Fujimura, Hiroshi Shimizu, Kiyoshi Yamamoto and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c02098>
81. Optimally Suppressed Phonon Tunneling in van der Waals Graphene-WS₂ Heterostructure with Ultralow Thermal Conductivity
Nano Lett., 24[43] (2024) pp.13754-13759
Wenyang Ding, Zhun-Yong Ong, Meng An, Brice Davier, Shiqian Hu, Masato Ohnishi and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c03930>
82. Environment-dependent tribochemical reaction and wear mechanisms of Diamond-like carbon: A reactive molecular dynamics study
Carbon, 231 (2025) Art.No.119713
Jing Zhang, Yang Wang, Qian Chen, Yixin Su, Shandan Bai, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi and Momoji Kubo
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119713>
83. Proton transfer driven by the fluctuation of water molecules in chitin film
J. Chem. Phys., 161[16] (2024) Art.No.164901
Hiroshi Matsui, Yusuke Takebe, Masae Takahashi, Yuka Ikemoto and Yasumitsu Matsuo
<https://doi.org/10.1063/5.0235566>
84. Porphyrinoid-Functionalized ZnO Nanoflowers for Visible Light-Enhanced and Selective Benzylamine Detection at Room Temperature
ACS Appl. Mater. Interfaces, 16[44] (2024) pp.61204-61217
Sheethal Sasi, Prasanth Palanisamy, Rence Painappallil Reji, Venkatramaiah Nutalapati, Surya Velappa Jayaraman, Yoshiyuki Kawazoe and Yuvaraj Sivalingam
<https://doi.org/10.1021/acsami.4c08117>

85. Generalization of Biasing Particle Insertion and Deletion for Grand Canonical Monte Carlo Simulation
J. Chem. Theory Comput., 20[21] (2024) pp.9364-9377
Tatsushi Ikeda and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c00755>
86. Efficient electrocatalytic oxygen evolution enabled by porous Eu-Ni(PO₃)₂ nanosheet arrays
J. Rare Earths, Journal Pre-proof (2024)
Pu Wang, Xiangrui Wu, Meng Li, Xuan Wang, Huiyu Wang, Qiuzi Huang, Hao Li, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1016/j.jre.2024.11.001>
87. Carbon-anchoring synthesis of Pt₁Ni₁@Pt/C core-shell catalysts for stable oxygen reduction reaction
Nat. Commun., 15 (2024) Art.No.9458
Jialin Cui, Di Zhang, Zhongliang Liu, Congcong Li, Tingting Zhang, Shixin Yin, Yiting Song, Hao Li, Huihui Li and Chunzhong Li
<https://doi.org/10.1038/s41467-024-53808-y>
88. Revisiting the Exposed Surface Characteristics on the Stability and Photoelectric Properties of MAPbI₃
ChemPhysChem, 26[4] (2024) Art.No.e202400897
Bingdong Zhang, Ruiyang Shi, Hongke Ma, Kai Ma, Zhengyang Gao and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/cphc.202400897>
89. Enhancing and mapping thermal boundary conductance across bonded Si-SiC interface
Appl. Surf. Sci., 682 (2025) Art.No.161724
Rulei Guo, Bin Xu, Fengwen Mu and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2024.161724>

90. Non-Adiabatic Excited-State Time-Dependent *GW* (TD*GW*) Molecular Dynamics Simulation of Nickel-Atom Aided Photolysis of Methane to Produce a Hydrogen Molecule
Nanomaterials, 14[22] (2024) Art.No.1775
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
<https://doi.org/10.3390/nano14221775>
91. Highly Selective, Room-Temperature Triethylamine Sensor Using Humidity-Resistant Novel TiZn Alloy Nanoparticles-Decorated MoS₂ Nanosheets
Small, 21[1] (2025) Art.No.2408500
Hajeesh Kumar Vikraman, Jeena George, Rahul Suresh Ghuge, Rence Painappallil Reji, Surya Velappa Jayaraman, Yoshiyuki Kawazoe, Yuvaraj Sivalingam and S.R.N. Kiran Mangalampalli
<https://doi.org/10.1002/sml.202408500>
92. Optical properties of rutile TiO₂ with Zr, Mo, Zn, Cd impurities
Comput. Condens. Matter, 41 (2024) Art.No.e00977
Kaoru Ohno, Ryoji Sahara, Takeshi Nanri and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1016/j.cocom.2024.e00977>
93. First-Principles Study on Twin Generation Induced by Symmetry Breaking in Cu-In Alloy
Journal of Japan Institute of Copper, 63[1] (2024) pp.93-98
Eun-Ae Choi, Satoshi Semboshi and Seung Zeon Han
https://doi.org/10.34562/jic.63.1_93
94. *p*-Orbital Ferromagnetism Arising from Unconventional O^{•−} Ionic State in a New Semiconductor Sr₂AlO₄ with Insufficiently Bonded Oxygen
Adv. Sci., 12[1] (2025) Art.No.2410977
Xu-Guang Zheng, Chao-Nan Xu, Tomoki Uchiyama, Ichihiko Yamauchi, Tomasz Galica, Eiji Nishibori and Ying Chen
<https://doi.org/10.1002/advs.202410977>

95. Anharmonicity and lattice thermal conductivity of negative thermal expansion materials $\text{Zn}(\text{CN})_2$ and $\text{Cd}(\text{CN})_2$ by first-principles calculations
Dalton Trans., 54[2] (2025) pp.764-773
Ya-Ning Sun, Lei Wang and Cong Wang
<https://doi.org/10.1039/D4DT02560A>
96. Critical Importance of Both Bond Breakage and Network Heterogeneity in Hysteresis Loop on Stress–Strain Curves and Scattering Patterns
Macromolecules, 57[23] (2024) pp.10903-10911
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.4c01996>
97. Unique magnetic transition process demonstrating the effectiveness of bond percolation theory in a quantum magnet
Nat. Commun., 15 (2024) Art.No.9989
Xu-Guang Zheng, Ichihiko Yamauchi, Masato Hagihara, Eiji Nishibori, Tatsuya Kawae, Isao Watanabe, Tomoki Uchiyama, Ying Chen and Chao-Nan Xu
<https://doi.org/10.1038/s41467-024-54335-6>
98. First-principles thermodynamic modeling for the Al-Nb-Ni ternary system
Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods, 4[1] (2024) Art.No.2412968
Arkapol Saengdeejing, Ryoji Sahara and Yoshiaki Toda
<https://doi.org/10.1080/27660400.2024.2412968>
99. Unconventional Thermal Rectification in Assemblies of Supertetrahedral T_3 -Type $\text{Sn}_4\text{In}_6\text{Se}_{20}$ Clusters
Nano Lett., 24[49] (2024) pp.15501-15508
Peng-Hu Du, Yoshiyuki Kawazoe and Qiang Sun
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c02977>
100. Divergent Activity Shifts of Tin-Based Catalysts for Electrochemical CO_2 Reduction: pH-Dependent Behavior of Single-Atom Versus Polyatomic Structures
Angew. Chem. Int. Ed., 64[8] (2024) Art.No.e202418228
Yuhang Wang, Di Zhang, Bin Sun, Xue Jia, Linda Zhang, Hefeng Cheng, Jun Fan and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/anie.202418228>

101. Parameter-Free Calculation for the Optical Bandgap Energies of InGaAlN
Phys. Status Solidi B, 262[3] (2025) Art.No.2400107
Takashi Matsuoka, Yoshiyuki Kawazoe and Talgat M. Inerbaev
<https://doi.org/10.1002/pssb.202400107>
102. Lattice oxygen insertion mechanism in CeO₂-catalyzed reactions in water: nitrile hydration reaction
Chem. Sci., 16[2] (2025) pp.939-951
Takaaki Endo, Tatsushi Ikeda, Koki Muraoka, Yusuke Kita, Masazumi Tamura and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1039/D4SC06294A>
103. Universal Polaronic Behavior in Elemental Doping of MoS₂ from First-Principles
ACS Nano, 18[50] (2024) pp.33988-33997
Soungmin Bae, Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara and Yu Kumagai
<https://doi.org/10.1021/acsnano.4c08366>
104. Who are the survivors? An investigation of long-time grain growth
Comput. Mater. Sci., 248 (2025) Art.No.113578
D. Zöllner and P.R. Rios
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113578>
105. Energetics and Dynamics of Metal-Ion Coordination with Ionic Liquid Electrolytes: A Combined DFT and AIMD Investigation for Rechargeable Batteries
J. Phys. Chem. C, 128[49] (2024) pp.20751-20764
Sreeram Jayan, Sarath Kumar Chedharla Balaji, Yuvaraj Sivalingam, Yoshiyuki Kawazoe and Surya Velappa Jayaraman
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c04520>
106. Core- versus End-Alkylation: Tailoring Solid-State Structures and Properties of Near-Infrared-Absorbing Organic Semiconductors Based on Naphthodithiophenediones
Chem. Mater., 36[24] (2024) pp.11920-11933
Kohsuke Kawabata, Kiyohito Mashimo and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c02436>

107. Asymmetric Rh–O–Co bridge sites enable superior bifunctional catalysis for hydrazine-assisted hydrogen production
Chem. Sci., 16[4] (2024) pp.1837-1848
Jinrui Hu, Xuan Wang, Yi Zhou, Meihan Liu, Caikang Wang, Meng Li, Heng Liu, Hao Li, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1039/D4SC07442D>
108. Simultaneous Superconducting and Topological Properties in Mg–Li Electrides at High Pressures
J. Phys. Chem. C, 129[1] (2025) pp.689-698
Dan Wang, Hongxing Song, Qidong Hao, Guangfa Yang, Hao Wang, Leilei Zhang, Ying Chen, Xiangrong Chen and Huayun Geng
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c06309>
109. Synergistic Effects of Ruthenium and Zinc Active Sites Fine Tune the Electronic Structures of Augmented Electrocatalysis
Adv. Funct. Mater., Early View (2024) Art.No.2422594
Tingyu Lu, Jing Li, Jingwen Ying, Ningkan Peng, Linda Zhang, Yizhou Zhang, Di Zhang, Songbo Ye, Lin Xu, Dongmei Sun, Hao Li, Yanhui Gu and Yawen Tang
<https://doi.org/10.1002/adfm.202422594>
110. Stable functional electrode–electrolyte interface formed by multivalent cation additives in lithium-metal anode batteries
J. Mater. Chem. A, 13[5] (2024) pp.3619-3633
Hongyi Li, Daichi Shimizu, Rongkang Jin, Tongqing Zhang, Daisuke Horikawa, Katsuhiko Nagaya, Hiroshi Tsubouchi, Hiroyuki Yamaguchi, Motoyoshi Okumura and Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1039/D4TA07531E>

<2025 年>

1. Stabilization of oxygen vacancy ordering and electrochemical-proton-insertion-and-extraction-induced large resistance modulation in strontium iron cobalt oxides $\text{Sr}(\text{Fe},\text{Co})\text{O}_y$
Nat. Commun., 16 (2025) Art.No.56
Yosuke Isoda, Thanh Ngoc Pham, Ryotaro Aso, Shuri Nakamizo, Takuya Majima, Saburo Hosokawa, Kiyofumi Nitta, Yoshitada Morikawa, Yuichi Shimakawa and Daisuke Kan
<https://doi.org/10.1038/s41467-024-55517-y>
2. Interaction of toxic metals with penta variant functional groups decorated carbon quantum dots: An in-silico investigation using density functional theory calculations towards water remediation/quality monitoring applications
J. Environ. Chem. Eng., 13[1] (2025) Art.No.115307
Chedharla Balaji Sarath Kumar, Sreeram Jayan, Rence Painappallil Reji, Yuvaraj Sivalingam, Yoshiyuki Kawazoe and Velappa Jayaraman Surya
<https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.115307>
3. Triphenylamine-porphyrin conjugates as antenna modular systems towards the detection of 1-hexanol through surface photovoltage under UV and visible light illumination using the scanning Kelvin probe
Sustainable Mater.Technol., 43 (2025) Art.No.e01239
Prasanth Palanisamy, Mageshwari Anandan, Sheethal Sasi, Arbacheena Bora, Rence P Reji, Sarath Kumar Chedharla Balaji, Yoshiyuki Kawazoe, Gurusamy Raman, Surya Velappa Jayaraman, Yuvaraj Sivalingam and Venkatramaiah Nutalapati
<https://doi.org/10.1016/j.susmat.2025.e01239>
4. Well-Defined PtCo@Pt Core-Shell Nanodendrite Electrocatalyst for Highly Durable Oxygen Reduction Reaction
Small, 21[8] (2025) Art.No.2410080
Shixin Yin, Yiting Song, Heng Liu, Jialin Cui, Zhongliang Liu, Yu Li, Tianrui Xue, Weizheng Tang, Di Zhang, Hao Li, Huihui Li and Chunzhong Li
<https://doi.org/10.1002/sml.202410080>

5. *end*-Methylthiolation on Acenes: Another Approach to Brickwork Crystal Structures
Cryst. Growth Des., 25[3] (2025) pp.687-693
Jisoo Shin, Kirill Bulgarevich and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c01481>
6. Structural Stabilization and Superior Electrochemical Performance of Yttrium-Doped O3-NaFe_{0.4}Ni_{0.3}Mn_{0.3}O₂ Cathodes for Sodium-Ion Batteries
Chem. Mater., 37[2] (2025) pp.709-723
Tingru Chen, Eugenio H. Otal, Tien Quang Nguyen, Shunsuke Narumi, Michihisa Koyama and Nobuyuki Zettsu
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c02852>
7. Understanding Mg-ion deposition behavior on MgBi alloy in solid-state form
Energy Mater., 5 (2025) Art.No.500022
Qian Wang, Hao Li, Ting Xu, Yungui Chen and Yigang Yan
<https://dx.doi.org/10.20517/energymater.2024.102>
8. Importing Atomic Rare-Earth Sites to Activate Lattice Oxygen of Spinel Oxides for Electrocatalytic Oxygen Evolution
Angew. Chem. Int. Ed., 64[3] (2025) Art.No.e202415306
Xuan Wang, Jinrui Hu, Tingyu Lu, Huiyu Wang, Dongmei Sun, Yawen Tang, Hao Li and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/anie.202415306>
9. Ultrahigh specific surface area mesoporous perovskite oxide nanosheets with rare-earth-enhanced lattice oxygen participation for superior water oxidation
J. Mater. Sci. Technol., 227 (2025) pp.255-261
Biao Wang, Xiangrui Wu, Suyue Jia, Jiayi Tang, Hao Wu, Xuan Wang, Shengyong Gao, Hao Li, Haijiao Lu, Gengtao Fu, Xiangkang Meng and Shaochun Tang
<https://doi.org/10.1016/j.jmst.2024.11.069>

10. Tuning photoluminescence of graphene oxide quantum dots from yellow to cyan
J. Alloys Compd., 1014 (2025) Art.No.178782
Mao Zhang, Longxu Cheng, Hongyi Luo, Hong Ouyang, Xuelin Wei, Fengzhen Lv, Changming Zhu, Jun Liu, Wenjie Kong, Fuchi Liu, Yong Yang, Qiwei Zhang and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.178782>
11. Neural network potential for molecular dynamics calculation of UO₂
J. Nucl. Mater., 607 (2025) Art.No.155660
Kenji Konashi, Nobuhiko Kato, Kazuki Mori and Ken Kurosaki
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2025.155660>
12. Data-Driven Accelerated Discovery Coupled with Precise Synthesis of Single-Atom Catalysts for Robust and Efficient Water Purification
Angew. Chem. Int. Ed., Early View (2025) Art.No.e202500004
Keng-Qiang Zhong, Fu-Yun Yu, Di Zhang, Zheng-Hao Li, Dong-Hua Xie, Ting-Ting Li, Yun Zhang, Li Yuan, Hao Li, Zhen-Yu Wu and Guo-Ping Sheng
<https://doi.org/10.1002/anie.202500004>
13. Discrete coordination nanochains based on photoluminescent dyes reveal intrachain exciton migration dynamics
Nat. Commun., 16 (2025) Art.No.1367
Ryojun Toyoda, Naoya Fukui, Haru Taniguchi, Hiroki Uratani, Joe Komeda, Yuta Chiba, Hikaru Takaya, Hiroshi Nishihara and Ryota Sakamoto
<https://doi.org/10.1038/s41467-025-56381-0>
14. Continuous formation and removal mechanism of tribolayer on silicon carbide under water lubricated conditions: A ReaxFF reactive molecular dynamics study
Tribol. Int., 206 (2025) Art.No.110579
Masayuki Kawaura, Yusuke Ootani, Shogo Fukushima, Yixin Su, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi and Momoji Kubo
<https://doi.org/10.1016/j.triboint.2025.110579>

15. Why Do Weak-Binding M-N-C Single-Atom Catalysts Possess Anomalously High Oxygen Reduction Activity?
J. Am. Chem. Soc., 147[7] (2025) pp.6076-6086
Di Zhang, Fangxin She, Jiaxiang Chen, Li Wei and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/jacs.4c16733>
16. Anomalous chirality dependence of strain energy in gold nanotubes
Phys. Rev. B, 111 (2025) Art.No.085414
Shota Ono and Hideo Yoshioka
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.085414>
17. Direct synthesis of a semiconductive double-helical phosphorus allotrope in a metal-organic framework
Nat. Commun., 16 (2025) Art.No.1578
Sergei A. Sapchenko, Rodion V. Belosludov, Inigo J. Vitoria-Irezabal, Ivan da Silva, Xi Chen, George F. S. Whitehead, John Maddock, Louise S. Natrajan, Meredydd Kippax-Jones, Dukula De Alwis Jayasinghe, Carlo Bawn, Daniil M. Polyukhov, Yinlin Chen, Vladimir P. Fedin, Sihai Yang and Martin Schröder
<https://doi.org/10.1038/s41467-025-55999-4>
18. Investigation of Homogeneous and Heterogeneous Cluster Formation in Mixtures of Ester and Hydroxy-Terminated *cis*-1,4-Polyisoprene Chains in Oligomers of Natural Rubber
ACS Appl. Eng. Mater., 3[2] (2025) pp.337-356
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1021/acsaenm.4c00679>
19. The efficient method of lattice dynamics calculation: Monte Carlo integration with importance sampling
J. Phys.: Condens. Matter, 37[13] (2025) Art.No.135902
Michimasa Morita and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1088/1361-648X/adb231>

20. Atomistic simulation of Guinier-Preston zone nucleation kinetics in Al-Cu alloys: A neural network-driven kinetic Monte Carlo approach
Comput. Mater. Sci., 251 (2025) Art.No.113771
Heting Liao, Jun-Ping Du, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.113771>
21. Gd-Induced Oxygen Vacancy Creation Activates Lattice Oxygen Oxidation for Water Electrolysis
Adv. Funct. Mater., Early View (2025) Art.No.2500118
Yong Wang, Yadong Liu, Sijia Liu, Yunpu Qin, Jianfang Liu, Xue Jia, Qiuling Jiang, Xuan Wang, Yongzhi Zhao, Luan Liu, Hongru Liu, Hong Zhao, Yirui Jiang, Dong Liang, Haoyang Wu, Baorui Jia, Xuanhui Qu, Hao Li and Mingli Qin
<https://doi.org/10.1002/adfm.202500118>
22. EFTGAN: Elemental features and transferring corrected data augmentation for the study of high-entropy alloys
npj computational materials, 11 (2025) Art.No.54
Yibo Sun, Cong Hou, Nguyen-Dung Tran, Yuhang Lu, Zimo Li, Ying Chen and Jun Ni
<https://doi.org/10.1038/s41524-025-01548-y>
23. Thermal and Photochemical Reactions of Organosilicon Compounds
Molecules, 30[5] (2025) Art.No.1158
Masae Takahashi
<https://doi.org/10.3390/molecules30051158>
24. Computational Insight into Selective Hydrogenolysis over Monomeric MoO_x-Modified Rh Catalysts in the Aqueous Phase
J. Phys. Chem. C, 129[11] (2025) pp.5361-5368
Kenshin Takei, Tatsushi Ikeda, Koki Muraoka, Yoshinao Nakagawa, Keiichi Tomishige and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c08142>

25. Isoelectronic substitution of a high-performance organic semiconductor with selenium atoms: synthesis and characterization of methylthiolated dibenzo[*cd,gh*][2,5]diselenapentalene
Asian J. Org. Chem., Accepted Articles (2025) Art.No.e202500173
Kazuo Takimiya, Kamon Sahara, Masashi Inoue, Kirill Bulgarevich and Kohsuke Kawabata
<https://doi.org/10.1002/ajoc.202500173>
26. Suppression of H₂O₂ Formation and Durability of Various Hydrogen Anode Catalysts for Long-Life Fuel Cells
J. Electrochem. Soc., 172[3] (2025) Art.No.034505
Muhammad Imran, Muhammad Farooq, Wataru Sugimoto, Mitsuharu Chisaka, Waka Nagano, Tatsuya Takeguchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, Hanako Nishino and Hiroyuki Uchida
<https://doi.org/10.1149/1945-7111/adbb24>
27. Ab Initio Calculations of Longitudinal Electrical Conductivity Using a Wannier-based Coherent Potential Approximation
J. Phys. Soc. Jpn., 94[4] (2025) Art.No.044703
Shota Namerikawa and Takashi Koretsune
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.94.044703>
28. Hydrogen Binding Energy Is Insufficient for Describing Hydrogen Evolution on Single-Atom Catalysts
Angew. Chem. Int. Ed., Early View (2025) Art.No.e202425402
Songbo Ye, Fangzhou Liu, Fangxin She, Jiaxiang Chen, Di Zhang, Akichika Kumatani, Hitoshi Shiku, Li Wei and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/anie.202425402>
29. Physical Significance of Descriptors to Predict the Band Center of High-Entropy Nanoalloys
J. Comput. Chem., 46[8] (2025) Art.No.e70086
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
<https://doi.org/10.1002/jcc.70086>

30. Topological constraint of ring fillers on the lamellar forming ABA-type tri-block copolymers using coarse-grained molecular dynamics simulations
Polymer, 326 (2025) Art.No.128334
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
<https://doi.org/10.1016/j.polymer.2025.128334>

Ⅲ. 国際会議発表論文

<Proceeding 2024 年>

1. ONLINE MEASUREMENT OF SILICON IN HOT METAL IN BLAST FURNACE
ABM WEEK 8th edition - 2024, 52nd Seminar on Ore Reduction and Raw Materials, São Paulo, Brasil, 2024, 52[52] (2024) pp.173-183
QUEIROZ ÉRICA VALÉRIO DE, ZANDOMENEGHI MATEUS VIEIRA, VIEIRA ALAN ALVES, CIPRIANI FERNANDO DORNAS and ALVES CELSO LUIZ MORAES
<https://doi.org/10.5151/2594-357X-40782>
2. STUDY OF THE EXTENSION OF STEEL MIXING IN THE CONTINUOUS CASTING
ABM WEEK 8th edition - 2024, 53rd Seminar on Steelmaking, Casting and Non-Ferrous Metallurgy, São Paulo, Brasil, 2024, 53[53] (2024) pp.376-385
FERREIRA MATHEUS LOPES, ALVES CELSO LUIZ MORAES, PEREIRA LUIS GUSTAVO GOMES and SANTOS RAFAELA PACHECO MALVÃO DOS
<https://doi.org/10.5151/2594-5300-40942>
3. Theoretical investigation of oxidation mechanism in Ti and its alloys
Proceedings of the 15th World Conference on Titanium (Ti-2023)
Chapter 12: Environmental Applications (2024) pp.91-93
Ryoji Sahara, Somesh Kr. Bhattacharya, Kanika Kohli, Prasenjit Ghosh, Kyosuke Ueda and Takayuki Narushima
<https://doi.org/10.7490/f1000research.1119895.1>

<Proceeding 2025 年>

1. Electron-Phonon Interactions in Crystals Revealed by THz Spectroscopy: Polar Coupling and Multi-phonon Scattering
2024 49th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz)
1/2 (2024) Art.No.122
Masae Takahashi, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and Yuka Ikemoto
<https://doi.org/10.1109/IRMMW-THz60956.2024>

<2023 年>

1. Data-Science and AI for Energy Materials Exploration
The 7th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 6th Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science and Spintronics
Tohoku University, Sendai, Japan/Online (2023.11.28-12.1) No.PM5 (Poster)
Xue Jia

<2024 年>

1. First principles study of electronic structures and stability in structural materials
Seminar at Indian Institute of Science Education and Research (IISER) Pune
Pune, India (2024.3.5) (Invited)
Ryoji Sahara
2. Playing with elements: Focus on Stability of High Entropy Alloys
Materials Department Seminar of University of Oxford
Hume-Rothery Lecture Theatre, Oxford, UK (2024.3.14) (Invied Seminar)
Ying Chen
3. Terahertz Spectroscopy for Distinguishing Calcium Oxalate Hydrates
The 13th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS2024)-Optics & Photonics International Congress 2024 (OPIC2024)
PACIFICO Yokohama, Japan (2024.4.22-26) No.ALPS14-03 (Oral)
Wangxuan Zhao, Verdad C. Agulto, Haruto Kobashi, Kosaku Kato, Mihoko Maruyama, Masae Takahashi, Yutaro Tanaka, Yusuke Mori, Masashi Yoshimura and Makoto Nakajima
4. First-principles Alloy Design for Cr-alloy Coated Zr-alloy Cladding of Nuclear Fuel
Depaertment of Materials Science, Chengdu University
Chengdu University, China (2024.5.13) (Invited Seminar)
Ying Chen

5. Crystal-Structure Control Of Molecular Semiconductors By Methylthiolation: Toward Ultrahigh Mobility
the International Union of Materials Research Societies–18th International Conference on Electronic Materials 2024 (IUMRS-ICEM 2024)
Hong Kong (2024.5.16-20) No.SK1-K2 (Keynote)
Kazuo Takimiya
6. Development of anharmonic phonon property database using first-principles calculations
The International Symposium on Multiscale Simulations of Thermophysics (MSTP)-2024
Beijing, China (2024.5.24-26) (Invited)
Masato Ohnishi
7. Effects of alloying element additions on shape-controlled single crystal growth of Ru alloys by the dewetting μ -PD method
HTC2024, 11th International Conference on High Temperature Capillarity
Sweden (2024.5.26-30) No.34 (Oral)
Rikito Murakami, Katsunari Oikawa, Kei Kamada, Shiika Itoi and Akira Yoshikawa
8. Ordering regimes in zirconium carbide
Calphad 2024
Mannheim, Germany (2024.5.26-31) (Poster)
Theresa Davey and Ying Chen
9. First-principles and machine learning prediction of stability and structural properties of transition metal HEAs
Calphad 2024
Mannheim, Germany (2024.5.26-31) (Poster)
Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Xinming Wang and Jun Ni
10. Non-adiabatic excited-state time-dependent GW molecular dynamics for an accurate description of chemical reactions
39th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics
Shizuoka City Culture Hall, Japan (2024.6.12-14) No.3P15 (Poster)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

11. Molecular Insight into the Adsorption and Conversion at the Liquid/Solid-Oxide Interface
Taiwan International Conference on Catalysis (TICC2024)
Taiwan (2024.6.19-21) (Keynote)
Akira Nakayama
12. Microstructure Prediction of High Temperature Alloys by a First-principles Phase Field Method
CIMTEC 2024
Montecatini Terme, Italy (2024.6.20-24) No.A-4:IL01 (Invited)
Ryoji Sahara, T. N. Pham, Saswata Bhattacharyya, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
13. First-principles Study on Alloy Phase Equilibria with Lattice Strain Relaxation
CIMTEC 2024
Montecatini Terme, Italy (2024.6.20-24) No.B-3:IL09 (Invited)
Ying Chen, Tetsuo Mohri and Toshiaki Horiuchi
14. In Situ Formation of Superlubricious Surfaces by Mechano-Chemical Decomposition of Organic Friction Modifiers
CIMTEC 2024
Montecatini Terme, Italy (2024.6.20-24) No.E-1:IL07 (Oral)
Takuya Kuwahara
15. Control of Crystal Structures of Molecular Semiconductors by Molecular Design
International Conference on Science and Technology of Synthetic Electronic Materials (ICSM2024)
Dresden, Germany (2024.6.23-28) (Invited)
Kazuo Takimiya
16. A Bond-order-based machine learning interatomic potential for carbon allotropes
NT24
Boston, USA (2024.6.23-28) (Poster)
Ikuma Kohata, Ryo Yoshikawa, Kaoru Hisama, Keigo Otsuka and Shigeo Maruyama

17. Novel Single Crystal Alloy Resistive Heating Wires for Highly Efficient Organic EL Film Deposition
CGCT-9, The 9th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology
Jeju, Korea (2024.6.24-26) (Invited)
Rikito Murakami
18. Large Language model assistant for designing organic structure-directing agents for zeolites
International Symposium on Zeolites and Micro Porous Crystals 2024 (ZMPC2024)
Knowledge Capital Congrès Convention Center, Osaka, Japan (2024.7.21-25)
No.RRR1-11 (Poster)
Shusuke Ito, Koki Muraoka and Akira Nakayama
19. Data-Driven Investigation of Diffusion Behaviors in Small-Pore Zeolites
International Symposium on Zeolites and Micro Porous Crystals 2024 (ZMPC2024)
Knowledge Capital Congrès Convention Center, Osaka, Japan (2024.7.21-25)
No.RRR2-01 (Poster)
Jing Ping, Koki Muraoka, Zhendong Liu and Akira Nakayama
20. High-throughput computational investigation of zeolite intergrowths
International Symposium on Zeolites and Micro Porous Crystals 2024 (ZMPC2024)
Knowledge Capital Congrès Convention Center, Osaka, Japan (2024.7.21-25)
No.RRR2-08 (Poster)
Kota Oishi, Koki Muraoka and Akira Nakayama
21. Small polaron formations in chemical doping of MoS₂ revealed from first principles
Defects from Fundamental Properties to Designed Functionalities
Newry, Maine, United States (2024.8.4-9) (Poster)
Soungmin Bae
22. Accelerated Discovery of Cathode Materials for Li-ion Batteries using General-Purpose Neural Network Potentials
Materials Informatics: Accelerating Materials Research and Design with Artificial Intelligence
Vietnam (2024.8.23-25) No.INV20 (Invited)
Tien Quang Nguyen and Michihisa Koyama

23. Mineral-Cluster Chemistry in Space: Planet-Forming Regions and Planetary Atmospheres
International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC Mongolia 2024)
Ulaanbaatar, Mongolia (2024.8.28-9.1) (Invited)
Masashi Arakawa
24. Density functional theory analysis of strain-induced NO₂ adsorption on defected graphene
34th International Conference on Diamond and Carbon Materials (ICDCM2024)
Dresden, Germany (2024.9.1-5) (Oral)
Meng Yin, Xiang Yu Qiao, Ying Chen, Lei Wang, Hideo Miura and Ken Suzuki
25. Electron-Phonon Interactions in Crystals Revealed by THz Spectroscopy: Polar Coupling and Multi-phonon Scattering
The 49th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz 2024)
University of South Australia, Perth, Australia (2024.9.1-6) (Keynote)
Masae Takahashi, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and Yuka Ikemoto
26. Atomistic Configurations in Mixed Crystals: Mixed Group-III Nitrides & High-entropy Alloys
Seminar in Institute of Physics (IOP)
Chinese Academy of Sciences (CAS), China (2024.9.4) (Invited)
Hiroshi Mizuseki
27. Large-scale MD simulations of spontaneous crystallization of stretched polymers
International Discussion Meeting on Polymer Crystallization 2024
Yonezawa, Yamagata, Japan (2024.9.17-20) No.15 (Invited)
Katsumi Hagita
28. Effect of phenylalanine dipeptide as an impurity protein on the formation of end-group clusters in natural rubber
The 11th international workshop on advanced materials science and nanotechnology (IWAMSN 2024)
Furama Resort, Danang, Vietnam (2024.9.22-25) No.AEM-I6 (Invited)
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi

29. Structural Transition in Grain Boundary: The Effect of Impurities
The 11th International Conference on Multiscale Materials Modeling
Prague Congress Center, Czech Republic (2024.9.22-27) No.3159 (Oral)
Qian Chen, Mitsuhiro Saito, Kazuaki Kawahara, Kazutoshi Inoue,
Atsutomo Nakamura and Yuichi Ikuhara
30. A neural network interatomic potential study of α -Fe-C binary system
The 11th International Conference on Multiscale Materials Modeling
Prague Congress Center, Czech Republic (2024.9.22-27) No.3404 (Oral)
Fan-Shun Meng, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Kazuki Matsubara and
Shigenobu Ogata
31. “Design and Synthesis” of organic semiconductor crystals for efficient carrier transport
The 15th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors,
and Magnets (ISCOM)
Anchorage, Alaska, USA (2024.9.22-27) (Invited)
Kazuo Takimiya and Kirill Bulgarevich
32. Accelerating Experimental Determination of Multicomponent Transition Metal Carbide
Phase Diagrams Using Uncertainty Quantification
MS&T24
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2024.10.6-9) (Invited)
Theresa Davey, William Rosenberg, Ying Chen and Scott McCormack
33. Electrocatalytic Activity and Structural Insights of Cu, Fe and N-Doped Mesoporous
Carbon for the Oxygen Reduction Reaction
PRiME2024
Honolulu, Hawaii (2024.10.6-11) No.Z02-4816 (Invited)
Masaru Kato, Hiroyuki Asakura and Ichizo Yagi
34. Crystal Morphologic Design of Na-Layered Oxide Crystals by Automated High-
Throughput Flux Method Experiments
PRiME2024
Honolulu, Hawaii (2024.10.6-11) No.A03-0403 (Oral)
Y. Shimizu, T. Yamada, K. Yanagisawa, M. Tipplook, F. Hayashi and K. Teshima

35. Multivalent Cation Additives for Building Dendrite-Free and Stable Electrode-Electrolyte Interface on Lithium-Metal Anodes
PRiME2024
Honolulu, Hawaii (2024.10.6-11) No.A07-0769 (Oral)
Hongyi Li and Tetsu Ichitsubo
36. Development of a Cr-Zr-X thermodynamic database for the design of new accident tolerant fuel systems
NuMat 2024: The Nuclear Materials Conference
Singapore, Singapore (2024.10.14-17) No.FT1.30 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
37. Coarse-grained MD Simulations for AI/Machine-Learning based Analysis on Polymer Networks Adhering to Patterned-Surface
The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10)
Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan (2024.10.20-24)
No.4A02 (Invited)
Katsumi Hagita
38. Structure-property relationship of nanoporous materials: Theoretical aspects
The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10)
Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan (2024.10.20-24)
No.3C08 (Oral)
Rodion V. Belosludov
39. Fabrication of layered organic-inorganic hybrid perovskite thin films by post-annealing of vacuum-deposited $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{NH}_3\text{I}/\text{SnI}_2$ bilayers
The 10th International Symposium on Surface Science (ISSS-10)
Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan (2024.10.20-24)
No.5B02 (Oral)
Ren Abe, Shingo Maruyama, Kenichi Kaminaga and Yuji Matsumoto

40. Non-adiabatic excited-state time-dependent GW molecular dynamics (TD GW) satisfying extended Koopmans' theorem: An accurate description of methane photolysis
The 2nd International Workshop of NIMS-TU Delft MOU (Jointly with International Center for Young Scientists (ICYS))
Tsukuba, Ibaraki, Japan (2024.10.24-25) (Invited)
Aaditya Manajath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
41. First-principles thermodynamic modeling for the Ni-Al-X ternary systems (X=Ti, Nb)
The 2nd International Workshop of NIMS-TU Delft MOU (Jointly with International Center for Young Scientists (ICYS))
Tsukuba, Ibaraki, Japan (2024.10.24-25) (Oral)
Arkapol Saengjdeejing, Ryoji Sahara and Yoshiaki Toda
42. Small polaron formations in chemical doping of MoS₂ revealed from first principles
The 25th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-25)
University of Ulsan, Ulsan, South Korea (2024.10.28-30) No.54 (Poster)
Soungmin Bae
43. A multiscale simulation without empirical parameter for designing structural materials
15th Annual Symposium of Indian Scientists Association in Japan (ISAJ)
Embassy of India, Tokyo, Japan (2024.10.29) No.PL-4 (Invited)
Ryoji Sahara
44. Time-dependent GW molecular dynamics for an accurate mechanistic description of the dynamics of chemical reactions
15th Annual Symposium of Indian Scientists Association in Japan (ISAJ)
Embassy of India, Tokyo, Japan (2024.10.29) (Poster)
Aaditya Manajath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
45. MD Simulations of Spontaneous Crystallization and Scattering Images of Semicrystalline Polymers
Cutting-Edge in Soft Matter Science 2024 (CeSMS2024)
Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan (2024.10.30-31) (Invited)
Katsumi Hagita

46. Molecular Insight into the Adsorption and Conversion at the Liquid/Solid-Oxide Interface
5th International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN 2024)
Newcastle, Australia (2024.11.4-8) No.3E-IL-2 (Invited)
Akira Nakayama
47. Approach to catalytic chemistry by Artificial Intelligence and Ab-Initio calculation
Symposium on Materials Theory, driven by Aphrodite, ab initio Computations, and Artificial Intelligence (AI3-2024)
Paphos, Cyprus (2024.11.5-9) (Keynote)
Ray Miyazaki
48. Thermodynamic stability and trapping activity in Ge-based perovskites
The 35th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-35)
Numazu, Japan (2024.11.10-15) No.Th1-P51-58 (Oral)
Qing Wang and Satoshi Iikubo
49. Approaches in Material Sciences: Accelerating Discovery and Innovation. GenAI and the Future of Research
Trilateral AI Conference 2024—Generative AI: Pathways to Democratization, Transparency and Sustainability—
Tokyo, Japan (2024.11.12-13) (Invited)
J.-C. Crivello
50. Identifying Materials Genes Describing Catalytic CO₂ Hydrogenation: an AI Approach with Theoretical and Experimental Data
FHI-ICAT joint symposium
Berlin, Germany (2024.11.18-19) (Poster)
Ray Miyazaki, Kendra Belthle, Harun Tüysüz, Lucas Foppa and Matthias Scheffler

51. Universal polaron formations in chemically-doped MoS₂ revealed from first principles
The 8th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 7th Symposium on International Joint Graduate Programs in Materials Science and Spintronics (CRCGP-MSSP2024)
Tohoku University, Sendai, Japan (2024.11.18-21) No.PM-45 (Poster)
Soungmin Bae, Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara and Yu Kumagai
52. First-Principles Study on Hydrogen Behaviors in Si Grain Boundaries
The 8th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 7th Symposium on International Joint Graduate Programs in Materials Science and Spintronics (CRCGP-MSSP2024)
Tohoku University, Sendai, Japan (2024.11.18-21) No.PM-48 (Poster)
Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara, Soungmin Bae and Yu Kumagai
53. The effect of impurities on the atomic structure of MgO grain boundaries in tunneling magnetoresistive devices
The 8th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 7th Symposium on International Joint Graduate Programs in Materials Science and Spintronics (CRCGP-MSSP2024)
Tohoku University, Sendai, Japan (2024.11.18-21) No.PM-53 (Poster)
Qian Chen, Mitsuhiro Saito, Kazuaki Kawahara, Kazutoshi Inoue, Atsutomo Nakamura and Yuichi Ikuhara
54. Looking Back on 20 Years of Organic Semiconductor Research (有機半導体研究 20 年を振り返って)
九州大学講演会
Kyushu University, Fukuoka, Japan (2024.11.21) (Invited)
Kazuo Takimiya
55. First-Principles Study on Hydrogen Behaviors in Si Grain Boundaries
ENGE2024
Jeju Shinhwa World, Jeju, Korea (2024.11.24-27) No.12-0451 (Oral)
Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara, Soungmin Bae and Yu Kumagai

56. Universal Small Polaron Formation in Chemical Doping of MoS₂ from First Principles
ENGE2024
Jeju Shinhwa World, Jeju, Korea (2024.11.24-27) No.12-1132 (Oral)
Soungmin Bae, Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara and Yu Kumagai
57. Non-adiabatic Excited-state Time-dependent *GW* Molecular Dynamics (TD*GW*)
Simulation for Photolysis of Methane
UM Global Academic Symposium 2024
University of Macau, Macao SAR, China (2024.12.1-3) (Invited)
Ryoji Sahara, Aaditya Manjanath, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
58. Theoretical Study of Functionalized Carbon-Based Nanomaterials Including Defects and Dopants
2024 MRS Fall Meeting & Exhibit
Boston, Massachusetts, USA (2024.12.1-6) No.NM01.11.33 (Poster)
Rodion Belosludov and Victor Nemykin
59. Exploring New Materials through Material Informatics
Data driven materials R&D activities A bilateral dialogue: France-Japan
Embassy of France in Japan, Tokyo, Japan (2024.12.5) (Invited)
J.-C. Crivello
60. Design and Synthesis of Molecular Semiconductor Crystals for High Mobility
CEMSupra Workshop 2024
Tsumagoi Mura, Gumma, Japan (2024.12.14-17) No.CEMS Lecture9 (Invited)
Kazuo Takimiya and Kirill Bulgarevich

<2025 年>

1. Machine Learning And High-Throughput Simulation Methods To Design Organic Structure-Directing Agents For Zeolites
6th Euro-Asia Zeolite Conference (EAZC-2025)
Alicante, Spain (2025.1.19-22) No.P070 (Poster)
Koki Muraoka, Kota Oishi, Shusuke Ito and Akira Nakayama

2. Analysis of Wear Behavior of Cross-linked Polymer Brush via Coarse-grained Molecular Dynamics Simulations
49th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2025)
Daytona Beach, Florida, USA (2025.1.26-31) No.ICACC-S10-019-2025 (Oral)
Yukihi Hara, Chihiro Suzuki, Yixin Su, Shogo Fukushima, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
3. Microscopic Understanding of Interface at Liquid/Solid-Oxide and Molecular Adsorption on the Surface by Neural Network Potentials
Pure and Applied Chemistry International Conference 2025 (PACCON 2025)
Khao Yai, Thailand (2025.2.13-15) No.PT-I-09 (Invited)
Akira Nakayama
4. Coarse-grained MD Simulations for Adhesive Polymer Networks Interlocking with Patterned-Surface
APS Global Physics Summit 2025
Anaheim, CA, USA and virtual (2025.3.16-21) (Oral)
Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Tomohiro Miyata and Hiroshi Jinnai
5. Ab initio calculations of longitudinal electrical conductivity using a Wannier-based coherent potential approximation
DPG Spring Meeting of the Condensed Matter Section (SKM) 2025
University of Regensburg, Germany (2025.3.16-21) (Poster)
Shota Namerikawa and Takashi Koretsune
6. Angle-resolved calculation of magnetocrystalline anisotropy using symmetry-adapted Wannier functions
DPG Spring Meeting of the Condensed Matter Section (SKM) 2025
University of Regensburg, Germany (2025.3.16-21) (Poster)
Hiroto Saito and Takashi Koretsune
7. Alloy Design for Cr-Alloy Coated Zr-Alloy Cladding of Nuclear Fuel
TMS 2025 Annual Meeting & Exhibition
Las Vegas, Nevada, USA (2025.3.23-27) (Invited)
Ying Chen, Theresa Davey, Bo Li and Hiroaki Abe

8. Uncertainty-Guided Determination of a Thermodynamic Database for Compositionally Complex UHTC Transition Metal Carbides
TMS 2025 Annual Meeting & Exhibition
Las Vegas, Nevada, USA (2025.3.23-27) (Invited)
Theresa Davey, William Rosenberg, Ying Chen and Scott McCormack
9. Design and Synthesis of Molecular Semiconductor Crystals for High Carrier Mobility
International Conference on Condensed Conjugation
Kyoto, Japan (2025.3.24-25) (Oral)
Kazuo Takimiya

IV. 予稿集

<Proceeding 2024 年>

1. 日本の計算物質工学・科学人材の育成動向の調査研究ー近年の材料工学・科学分野におけるデータ科学関連の博士人材育成の動向ー
工学教育研究講演会講演論文集
第 72 回年次大会 (2024 年度) (2024) pp.82-83
寺田弥生
https://doi.org/10.20549/jseeja.2024.0_82

<2023 年>

1. $\text{Rb}_3\text{H}(\text{X}/\text{O}_4)_2$ ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}$) のダイマー内プロトン移動と非調和フォノン
日本物理学会第 78 回年次大会(2023 年)
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18pB104-2 (Oral)
平田佳佑、池本夕佳、松尾康光、高橋まさえ、松井広志

<2024 年>

1. 高分子固体中における発光性ジピリン亜鉛(II)分子ワイヤー内励起子移動
日本化学会第 104 春季年会(2024)
日本大学理工学部船橋キャンパス (2024.3.18-21) No.F1233-3am-09 (Oral)
谷口晴、豊田良順、高石慎也、坂本良太
2. ナノ結晶アモルファス合金に及ぼす磁歪の影響評価
第 71 回応用物理学会春季学術講演会
東京都市大学世田谷キャンパス/オンライン (2024.3.22-25)
No.25a-P01-15 (Poster)
野崎岳人、山崎貴大、Lira Foggiatto Alexandre、三俣千春、小嗣真人
3. 高磁歪材料創製のための磁歪予測と因果解析
第 71 回応用物理学会春季学術講演会
東京都市大学世田谷キャンパス/オンライン (2024.3.22-25)
No.25a-P01-16 (Poster)
早川聡、山崎貴大、中村航平、三俣千春、Foggiatto Alexandre、
Varadwaj Arpita、福健太郎、小嗣真人

4. 第一原理フェーズフィールド法による微細組織予測
日本鉄鋼協会九州支部/日本金属学会九州支部共催 2024 年度春季講演会
オンライン (2024.4.19) No.2 (Invited)
佐原亮二、T. N. Pham、S. Bhattacharyya、桑原理一、大野かおる
5. Development of n-type molecular dopants based on dipyranylidene derivatives
Mini-Symposium on π -Conjugated Materials
the Chinese University of Hong Kong (2024.5.16) (Invited)
Kazuo Takimiya
6. 非調和フォノン特性の自動計算とデータベース構築
第 8 回フォノンエンジニアリング研究会
沖縄県宮古島 (2024.5.17-18) No.Fri-14 (Oral)
大西正人、塩見淳一郎
7. 有機半導体材料を指向した 3,5-bis(methylthio)phenyl 基を有する複素芳香族化合物
の合成と結晶構造
第 35 回万有仙台シンポジウム 地区交流ミニシンポジウム
仙台 (2024.5.17) (Oral)
新開陽介、Kirill Bulgarevich、川畑公輔、瀧宮和男
8. 3-ジシアノメチレンチエノチオフェン構造で終端した電子アクセプターの合成と
有機薄膜太陽電池への応用
第 35 回万有仙台シンポジウム 生物応答と分子機能に挑戦する有機合成：四
半世紀を経て
東北大学百周年記念会館川内萩ホール (2024.5.18) No.P-17 (Poster)
柴橋健亮、中村真人、川畑公輔、瀧宮和男
9. 狭帯域な青紫・深青色遅延蛍光を示す *N,S*-架橋型プラナートリフェニルボランの
合成
第 35 回万有仙台シンポジウム 生物応答と分子機能に挑戦する有機合成：四
半世紀を経て
東北大学百周年記念会館川内萩ホール (2024.5.18) No.P-20 (Poster)
秋葉真惟子、小川敦也、北本雄一、藤本裕、越水正典、大井秀一、
服部徹太郎

10. 酸化セリウム／水界面におけるプロトンリレーダイナミクスのセミマルコフ過程モデルによる速度論解析
第 26 回理論化学討論会
筑波大学大学会館 (2024.5.21-23) No.1L10 (Oral)
池田龍志
11. AI による理論データと実験データの統合: CO₂ 水素化触媒反応を記述する Materials Genes の同定
第 26 回理論化学討論会
筑波大学大学会館 (2024.5.21-23) No.1L11 (Oral)
宮崎玲
12. ニューラルネットワーク分子動力学法による摩擦誘起の化学反応プロセスの解析: 窒化ケイ素水潤滑システムにおける耐荷重性向上添加剤の化学反応
第 26 回理論化学討論会
筑波大学大学会館 (2024.5.21-23) No.2L02 (Oral)
大谷優介、工藤龍太郎、福島省吾、尾澤伸樹、久保百司
13. MoO_x 担持金属触媒を用いた選択的水素化分解反応機構の理論的解明
第 26 回理論化学討論会
筑波大学大学会館 (2024.5.21-23) No.P207 (Poster)
竹井健真
14. 酸素発生反応における金属酸化物触媒の活性の比較
第 26 回理論化学討論会
筑波大学大学会館 (2024.5.21-23) No.P216 (Poster)
Yingkai Wu, Yuta Tsuji, Toshiyuki Matsunaga and Yoshiharu Uchimoto
15. ハイスループットフラックス法自動実験による層状酸化物の結晶育成探索
日本材料科学会 2024 年度学術講演大会
早稲田大学早稲田キャンパス (2024.5.22-23) No.01 (Oral)
清水祐作、山田哲也、柳澤和道、Mongkol Tippllook、林文隆、手嶋勝弥

16. 現状の問題点を解決する予測可能な真の第一原理計算法の開発と応用
ナノ学会第 22 回大会
東北大学青葉山新キャンパス (2024.5.22-24) No.O-39 (Oral)
Manjanath Aaditya、佐原亮二、水関博志、大野かおる、南里豪志、
川添良幸
17. Thermodynamic Database Modeling from First-principles Calculations
ナノ学会第 22 回大会
東北大学青葉山新キャンパス (2024.5.22-24) No.P-86 (Poster)
Arkapol Saengjdeejing, Ryoji Sahara, Yoshiaki Toda, Yoshiyuki Kawazoe and
Kazuyuki Higashino
18. Non-adiabatic excited-state time-dependent GW molecular dynamics for an accurate
description of chemical reactions
ナノ学会第 22 回大会
東北大学青葉山新キャンパス (2024.5.22-24) No.P-87 (Poster)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
19. Molecular dynamics simulation for temperature dependency in stress-assisted diffusion
wear behavior at the interface between Ti with Hap
日本材料学会第 73 期学術講演会
出島メッセ長崎 (2024.5.24-26) No.718 (Oral)
Pham Dinh Dat、大塚雄市、宮下幸雄
20. Al-Cu 合金の固溶・析出強化の素過程に関する原子シミュレーション
日本材料学会第 9 回マルチスケール材料力学シンポジウム
出島メッセ長崎 (2024.5.24) No.P10 (Poster)
金井健太、君塚肇
21. 高移動度有機半導体への分子科学的アプローチ
第 73 回高分子学会年次大会
仙台国際センター (2024.6.5-7) No.3A18IL (Invited)
瀧宮和男

22. 河川蛇行曲線モデルを用いた架橋ポリマーネットワークの接着剥離挙動シミュレーション
第 73 回高分子学会年次大会
仙台国際センター (2024.6.5-7) No.3Pb036 (Poster)
萩田克美、村島隆浩、宮田知衆、陣内浩司
23. 多元素材料の熱力学的安定配置探索のための Wang-Landau アルゴリズムの実装とナノ合金への応用
日本コンピュータ化学会 2024 年春季年会
東京工業大学大岡山キャンパス (2024.6.6-7) No.2A01 (Oral, 吉田賞(論文賞))
難波優輔、古山通久
24. Investigation of Formation Process of Organic-inorganic Hybrid Materials from Vacuum-Deposited Bilayer Thin Films of $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{NH}_2$ and SnI_2 by Post-Annealing
Chemistry Summer School 2024
Tohoku University (2024.7.19-20) No.P-28 (Poster)
Ren Abe, Shingo Maruyama, Kenichi Kaminaga and Yuji Matsumoto
25. DLC のトライボケミストリー：シミュレーションによるメカニズム解明と摩擦界面設計
2024 年度第 1 回トライボケミストリー研究会
オンライン (2024.8.26) No.① (Oral)
桑原卓哉
26. ONLINE MEASUREMENT OF SILICON IN HOT METAL IN BLAST FURNACE
8° ABM Week - 52° Seminário de Redução de Minérios e Matérias-Primas
São Paulo, Brazil (2024.9.3-5) (Oral)
QUEIROZ ÉRICA VALÉRIO DE, ZANDOMENEGHI MATEUS VIEIRA,
VIEIRA ALAN ALVES, CIPRIANI FERNANDO DORNAS and
ALVES CELSO LUIZ MORAES

27. STUDY OF THE EXTENSION OF STEEL MIXING IN THE CONTINUOUS CASTING

8° ABM Week - 53° Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos
São Paulo, Brazil (2024.9.3-5) (Oral)
FERREIRA MATHEUS LOPES, ALVES CELSO LUIZ MORAES,
PEREIRA LUIS GUSTAVO GOMES and
SANTOS RAFAELA PACHECO MALVÃO DOS

28. 日本の計算物質工学・科学人材の育成動向の調査研究ー近年の材料工学・科学分野におけるデータ科学関連の博士人材育成の動向ー

第 72 回年次大会・工学教育研究講演会
九州大学伊都キャンパス (2024.9.4-6) No.1E05 (Oral)
寺田弥生

29. 第一原理的分子動力学法による摩擦研究

2024 年度基研研究会「摩擦学の新展開：アモントン・クーロン則を超えて」
京都大学基礎物理学研究所パナソニックホール (2024.9.5-6) (Oral)
桑原卓哉

30. 表面修飾無機固体／高分子間の親和性および界面熱抵抗に及ぼすナノスケール構造の影響

化学工学会第 55 回秋季大会
北海道大学札幌キャンパス (2024.9.11-13) No.H201 (Oral)
斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、Surblys Donatas、
久保百司

31. Electronic structures of non-fullerene acceptors terminated with 3-(dicyanomethylene)benzothiophenes

令和 6 年度化学系学協会東北大会
秋田大学手形キャンパス (2024.9.14-15) (Poster)
柴橋健亮、川畑公輔、瀧宮和男

32. Synthesis and electronic structure of a D-A-D triad having naphthodipyrrolidone and oligothiophenes
令和 6 年度化学系学協会東北大会
秋田大学手形キャンパス (2024.9.14-15) (Poster)
栗田駿之介、川畑公輔、瀧宮和男
33. Fine-structure constant representing the coupling strength of electron-phonon interaction in a crystal
日本物理学会第 79 回年次大会(2024 年)
北海道大学(札幌キャンパス) (2024.9.16-19) No.16aE317-10 (Oral)
高橋まさえ
34. 環状鎖を充填したブロックコポリマーのラメラ相分離構造のトポロジー効果の粗視化 MD 検討
日本物理学会第 79 回年次大会(2024 年)
北海道大学(札幌キャンパス) (2024.9.16-19) No.17aE302-11 (Oral)
萩田克美、村島隆浩
35. ジピラニリデン誘導体を基盤とする n 型分子ドーパントの開発
第 85 回応用物理学会秋季学術講演会
朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (2024.9.16-20)
No.17a-A24-5 (Invited)
瀧宮和男、松尾崇也
36. Exploration of New Superhard Carbon Allotropes by a Bond-Order-Based Machine-Learning Interatomic Potential
第 85 回応用物理学会秋季学術講演会
朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (2024.9.16-20)
No.16p-A31-11 (Oral)
Ikuma Kohata, Kaoru Hisama, Keigo Otsuka and Shigeo Maruyama

37. Identification of calcium oxalate hydrates by terahertz spectroscopy
第 85 回応用物理学会秋季学術講演会
朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (2024.9.16-20)
No.18p-B2-7 (Oral)
Wangxuan Zhao, Haruto Kobashi, Verdad C. Agulto, Kosaku Kato,
Mihoko Maruyama, Masae Takahashi, Yutaro Tanaka, Yusuke Mori,
Masashi Yoshimura and Makoto Nakajima
38. アセンのメチルチオ化と結晶構造制御：herringbone から π -stack 系へ
第 85 回応用物理学会秋季学術講演会
朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (2024.9.16-20)
No.18a-B6-5 (Oral)
Bulgarevich Dmitrievich Kirill、Shin Jisoo、金澤輝石、瀧宮和男
39. Ru-Mo-W 単結晶線材の Dewetting マイクロ引き下げ法における偏析挙動および
電気抵抗率の組成依存性
第 85 回応用物理学会秋季学術講演会
朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (2024.9.16-20)
No.20p-D62-1 (Oral)
米村虎太郎、村上力輝斗、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、花田貴、
山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、横田有為、吉川彰
40. 固体酸化物・水界面でのプロトンリレー反応における非マルコフ的速度論
化学反応経路探索のニューフロンティア 2024
京都大学福井謙一記念研究センター (2024.9.17) (Invited)
池田龍志
41. ラマン質量法を用いたカルサイトの ^{17}O の検出と精度
2024 年度日本地球化学会第 71 回年会
金沢大学角間キャンパス自然科学本館 (2024.9.18-20) No.PR0006 (Oral)
井上裕貴、荒川雅、白井厚太郎、山本順司

42. 等モル比ハイエントロピー合金の規則-不規則共存相のハイスループット第一原理計算

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.S2.2 (Oral)
水関博志、佐原亮二、本郷研太

43. TiHfNiPd の相変態におけるハイエントロピー化の影響

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.S2.24 (Oral)
松本遼、吉野哲生、浅田祐実、沈佑年、佐原亮二、松永紗英、御手洗容子

44. Ni 基固溶体合金の転位易動度に対する溶質偏析の影響に関する原子論的解析

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.S5.25 (Oral)
君塚肇

45. Si 粒界中の不純物水素の挙動に関する第一原理計算

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.S8.29 (Oral)
宮本伊武己、清原慎、裴星旻、熊谷悠

46. 錯体水素化物 $\text{LaMg}_2\text{NiH}_7$ の熱伝導率予測

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.124 (Oral)
三輪和利、佐藤豊人、近藤剛弘、折茂慎一

47. $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}:\text{Nd}$ の第一原理計算による物性評価

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.P73 (Poster)
音成航希、坂谷有彩、常井翔矢、川名惣一郎、内山智貴、鄭旭光、徐超男

48. Ru-Mo-W 合金単結晶線材の特性に及ぼす不純物元素の影響

日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.P100 (Poster)
米村虎太郎、村上力輝斗、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、花田貴、
山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、横田有為、吉川彰

49. 沸騰硫酸および塩酸中における Ru-Mo-W-Fe 合金の耐食性
日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
大阪大学豊中キャンパス (2024.9.18-20) No.P192 (Poster)
Murugesan Naveenkarthik、村上力輝斗、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、
花田貴、山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、
横田有為、吉川彰
50. 不均一系触媒反応の理解を目指して: 電子状態計算と AI からのアプローチ
第 134 回触媒討論会
名古屋大学東山キャンパス (2024.9.18-20) No.3D07 (Invited)
宮崎玲
51. NO 吸着による PdRu ナノ合金の表面状態変化に関する理論的研究
第 134 回触媒討論会
名古屋大学東山キャンパス (2024.9.18-20) No.3D10 (Oral)
難波優輔、羽田政明、古山通久
52. サイズ選別した酸化鉄クラスター正イオンとメタンとの反応: 火星大気での急
速なメタン消失のモデル研究
第 18 回分子科学討論会
京都大学吉田キャンパス (2024.9.18-21) No.1C13 (Oral)
荒川雅、河野聖、関根康人、寺寄亨
53. ニューラルネットワークポテンシャルを用いた固体表面吸着状態の理論的解析
第 18 回分子科学討論会
京都大学吉田キャンパス (2024.9.18-21) No.1P100 (Poster)
菅野智也、池田龍志、中山哲
54. 反応分子動力学法を用いた酸化亜鉛／水界面の長時間ダイナミクス解析
第 18 回分子科学討論会
京都大学吉田キャンパス (2024.9.18-21) No.2P076 (Poster)
掛川桃李、池田龍志、中山哲

55. グランドカノニカルモンテカルロ法における効率的な挿入削除バイアス法の開発
第 18 回分子科学討論会
京都大学吉田キャンパス (2024.9.18-21) No.3P094 (Poster)
池田龍志、中山哲
56. 第一原理計算による Au/Fe₂O₃ 触媒上でのエーテルのシリル化反応の機構解析
第 18 回分子科学討論会
京都大学吉田キャンパス (2024.9.18-21) No.3P101 (Poster)
常定祐之介、池田龍志、村岡恒輝、土井雅史、三浦大樹、穴戸哲也、
中山哲
57. ボンド切断するファントム鎖モデル計算による応力歪関係に対するネットワーク構造の影響
第 73 回高分子討論会
新潟大学五十嵐キャンパス (2024.9.25-27) No.2I12 (Oral)
萩田克美、村島隆浩、印出井努
58. Electronic structures of non-fullerene acceptors terminated with 3-(dicyanomethylene)benzothiophenes
2024 年第 19 回有機デバイス・物性院生研究会
京都大学宇治キャンパス (2024.10.1-3) (Oral)
柴橋健亮、川畑公輔、瀧宮和男
59. 高移動度有機半導体への分子科学的アプローチ
物性研短期研究会「新物質開発・システム創成研究の最前線：分子・クラスターがもたらす物性と機能」
物性研究所 (2024.10.2-4) (Invited)
瀧宮和男
60. キノイド型ナフトジピロリドンとオリゴチオフェンからなる D-A-D オリゴマーの合成と電子構造
物性研短期研究会「新物質開発・システム創成研究の最前線：分子・クラスターがもたらす物性と機能」
物性研究所 (2024.10.2-4) No.5 (Poster)
栗田駿之介

61. 電子受容性ヘテロ環縮合キノイドを基盤とした有機半導体分子の設計
物性研短期研究会「新物質開発・システム創成研究の最前線：分子・クラスターがもたらす物性と機能」
物性研究所 (2024.10.2-4) No.6 (Poster)
川畑公輔
62. Simulation of polymer melt spinning process — Multiscale approach using Kremer Grest CG model—
第 72 回レオロジー討論会
山形テルサ (2024.10.17-18) No.2A15 (Oral)
Yan Xu and Takashi Taniguchi
63. Dynamics of Entangled Star Polymers: Comparison between Slip-Spring and Molecular Dynamics Simulations
第 72 回レオロジー討論会
山形テルサ (2024.10.17-18) No.2A16 (Oral)
Takeshi Sato, Takahiro Murashima and Ronald G. Larson
64. Exploring ω -Terminals in *cis*-1,4-Polyisoprene: Molecular Dynamics Insights into Polar Aggregate Formation in Natural Rubber
第 72 回レオロジー討論会
山形テルサ (2024.10.17-18) No.2E09 (Oral)
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
65. Energetics of the Precipitation of α -Cu₄Ti in Cu-Ti Alloys with Various Additives Based on Density Functional Theory
日本銅学会：第 64 回講演大会
ライトキューブ宇都宮 (2024.10.18-20) No.8 (Oral)
Eun-Ae Choi and Seung Zeon Han
66. 多元素材料の状態密度予測とナノ合金への応用
日本コンピュータ化学会 2024 年秋季年会
FK ホールディングス生涯学習センター・きらん、室蘭市(2024.10.19-21)
No.2004 (Oral)
難波優輔、古山通久

67. 蛍石型結晶の二次元物質が示す負のポアソン比
日本コンピュータ化学会 2024 年秋季年会
FK ホールディングス生涯学習センター・きらん、室蘭市 (2024.10.19-21)
No.2009 (Oral)
小野頌太、Ravinder Pawar
68. Theoretical Study of high entropy spinel oxides for oxygen evolution reaction
日本コンピュータ化学会 2024 年秋季年会
FK ホールディングス生涯学習センター・きらん、室蘭市 (2024.10.19-21)
No.P204 (Poster)
呉英凱、辻雄太、Song Dongyuan、Yip Senpo
69. 粗視化分子動力学シミュレーションによる架橋ポリマーブラシの摩耗挙動の解析
トライボロジー会議 2024 秋 名護
万国津梁館、沖縄 (2024.10.30-1) No.D45 (Oral)
原幸日、蘇怡心、福島省吾、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
70. シミュレーションが拓く摩擦界面の科学
トライボロジー会議 2024 秋 名護
万国津梁館、沖縄 (2024.10.30-1) No.E15 (Oral)
桑原卓哉
71. 理論計算と AI による触媒反応の理解と設計に向けたアプローチ
近畿化学協会コンピュータ化学部会 (第 120 回例会) 公開講演会
「グリーントランスフォーメーションを先導する計算・情報化学」
大阪府摂津市/オンライン (2024.10.30-0) No.(2) (Invited)
宮崎玲
72. チタンの熱酸化を利用した抗菌・抗ウイルス化表面創製
第 4 回日本チタン学会講演大会(2024 年度)
東北大学金属材料研究所 (2024.11.1) No.10 (Oral)
成島尚之、上田恭介、古泉隆佑、Sunyong Shim、佐原亮二、小笠原康悦

73. TiHfNiPd の相変態におけるハイエントロピー化の影響
第 4 回日本チタン学会講演大会(2024 年度)
東北大学金属材料研究所 (2024.11.1) No.P3 (Poster)
松本遼、吉野哲生、浅田祐実、沈佑年、佐原亮二、松永紗英、御手洗容子
74. アミン修飾 Ag/硬化剤界面の構造と相互作用に関する分子動力学解析
化学工学会宇都宮大会 2024
宇都宮市 (2024.11.7-8) No.E105 (Oral)
黒沢陽一郎、斎藤高雅、岡田洋平、犬束学、所千晴、庄司衛太、久保正樹
75. Ru-Mo-W 合金 (Ruscaloy) 単結晶線材の育成における結晶方位と特性の異方性
第 53 回結晶成長国内会議 (JCCG-53)
工学院大学新宿キャンパス (2024.11.18-20) No.20a-C08 (Oral)
村上力輝斗、米村虎太郎、Murugesan Naveenkalthik、糸井椎香、鎌田圭、
吉川彰
76. Dewetting マイクロ引下法による Ru-Mo-W-Fe 合金結晶の育成と耐食性
第 53 回結晶成長国内会議 (JCCG-53)
工学院大学新宿キャンパス (2024.11.18-20) No.20a-C09 (Oral)
Murugesan Naveenkarthik、村上力輝斗、米村虎太郎、糸井椎香、鎌田圭、
堀合毅彦、花田貴、山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、
黒澤俊介、横田有為、吉川彰
77. Dewetting マイクロ引き下げ法での Ru-Mo-W 単結晶線材育成における組成変化
第 53 回結晶成長国内会議 (JCCG-53)
工学院大学新宿キャンパス (2024.11.18-20) No.19a-P17 (Poster)
米村虎太郎、村上力輝斗、Murugesan Naveenkarthik、糸井椎香、鎌田圭、
堀合毅彦、花田貴、山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、
黒澤俊介、横田有為、吉川彰
78. Enhancing Stability of Sodium-Ion Battery Cathodes: Insights from Y-Doping and Multi-Phase Stacking Simulations
第 65 回電池討論会
国立京都国際会館 (2024.11.20-22) No.2I21 (Oral)
Tien Quang Nguyen, Tingru Chen, Shunsuke Narumi, Nobuyuki Zettsu and
Michihisa Koyama

79. $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O:Nd}$ の第一原理計算による力学特性評価
第 44 回電子材料研究討論会
慶應義塾大学日吉キャンパス (2024.11.21-22) No.1P04 (Poster)
音成航希、川名惣一朗、平田研二、藤尾侑輝、内山智貴、鄭旭光、徐超男
80. 種々の汎用力場のゼオライトへの有効性に関する研究
吸着ーゼオライト合同研究発表会 (第 37 回日本吸着学会研究発表会、第 40 回ゼオライト研究発表会)
タワーホール船堀、東京都 (2024.12.2-4) No.3A-12 (Oral)
伊東周昌、村岡恒輝、中山哲
81. 酸化セリウム触媒によるニトリル水和反応機構の自由エネルギー解析
第 38 回分子シミュレーション討論会
アクリエひめじ、兵庫県姫路市 (2024.12.2-4) No.173P (Poster)
遠藤昂晶、池田龍志、村岡恒輝、喜多祐介、田村正純、中山哲
82. P2 型 Na 含有層状酸化物結晶育成に関するロボット自動実験と機械学習の活用
第 18 回日本フラックス成長研究発表会
徳島市 (2024.12.12-14) No.1O03 (Oral)
清水祐作、山田哲也、柳澤和道、Mongkol Tipplook、林文隆、手嶋勝弥
83. 第一原理計算を用いた Si 粒界中不純物水素の挙動の理解
第 34 回日本 MRS 年次大会
横浜市開港記念会館 他 (2024.12.16-18) No.A2-O16-009 (Oral)
宮本伊武己、清原慎、ベ ソンミン、熊谷悠
84. Universal small polaron formation in chemical doping of MoS_2 from first principles
第 34 回日本 MRS 年次大会
横浜市開港記念会館 他 (2024.12.16-18) No.A2-O17-004 (Oral)
ベ ソンミン、宮本伊武己、清原慎、熊谷悠
85. 非ファンデルワールス型 2D 物質の負のポアソン比
第 34 回日本 MRS 年次大会
横浜市開港記念会館 他 (2024.12.16-18) No.A2-O17-010 (Oral)
小野頌太、Ravinder Pawar

86. 多元素ナノ合金の状態密度予測

第 34 回日本 MRS 年次大会

横浜市開港記念会館 他 (2024.12.16-18) No.A3-O18-005 (Oral)

難波優輔、古山通久

87. 2 次元 MoS_2 の元素ドーピングにおける普遍的な局所ポーラロン形成の発見

第 147 回東北大学金属材料研究所講演会

東北大学金属材料研究所 (2024.12.20) (Oral)

Soungmin Bae

<2025 年>

1. Enhancement of Thermoelectric Performance for Clathrate Compounds Considering Finite Temperature Effects

The 1st A3 Nano & Thermal Energy Engineering Workshop

The University of Tokyo (2025.1.13-15) No.P1-8 (Poster)

Masato Ohnishi, Terumasa Tadano, Shinji Tsuneyuki and Junichiro Shiomi

2. Grain boundaries enhanced thermal transport in 2D SnSe

The 1st A3 Nano & Thermal Energy Engineering Workshop

The University of Tokyo (2025.1.13-15) No.P2-5 (Poster)

Jie Sun and Junichiro Shiomi

3. Suppression of thermal transport due to impurities in disordered systems

The 1st A3 Nano & Thermal Energy Engineering Workshop

The University of Tokyo (2025.1.13-15) No.P2-17 (Poster)

Chirag Anlikumar, Kunihiko Shizume and Junichiro Shiomi

4. ニューラルネットワークポテンシャルを用いた表面・界面の分子シミュレーション

計算科学研究センター・計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業合同ワークショップ

岡崎コンファレンスセンター/ハイブリッド (2025.1.15-16) (Invited)

中山哲

5. Ru-Mo-W-Fe 合金の結晶育成および耐食性

ARG 講演会/第 102 回若手講演会/第 5 回研究会(複合開催)

『エネルギー・環境マテリアル研究の最前線～若手研究者の挑戦』

信州大学アクア・リジェネレーション機構長野工学キャンパス AICS

(2025.1.22-23) No.1P17 (Poster)

Murugesan Naveenkarthik、村上力輝斗、米村虎太郎、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、花田貴、山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、横田有為、吉川彰

6. Ca 偏析による MgO 粒界の構造変化の解明

2025 年年会公益社団法人日本セラミックス協会

静岡大学浜松キャンパス (2025.3.5-7) No.2E29 (Oral)

陳茜、斎藤光浩、川原一晃、井上和俊、中村篤智、幾原雄一

7. 計算物質科学分野の人材育成動向に関する調査研究—大規模言語モデルを用いた分野判別の可能性に関する検討—

日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会

東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.8 (Oral)

寺田弥生

8. 超臨界酸中における Ru-Mo-W-Fe 合金の耐食性および硫酸中の電気化学測定

日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会

東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.48 (Oral)

Murugesan Naveenkarthik、村上力輝斗、米村虎太郎、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、花田貴、山路晃広、吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、横田有為、吉川彰

9. LaMg₂Ni-H 系材料の熱伝導率予測

日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会

東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.84 (Oral)

三輪和利、佐藤豊人、近藤剛弘、折茂慎一

10. DFT Study of the precipitation behavior of α -Cu₄Ti in Cu-Ti alloys with various additives

日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会

東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.338 (Oral)

Eun-Ae Choi and Seung Zeon Han

11. 第一原理計算と機械学習予測による Cantor-derived ハイエントロピー合金の展開
日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会
東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.347 (Oral)
陳迎、Tran Nguyen-Dung、Yibo Sun、Jun Ni
12. バナジウム中水素の拡散・捕捉挙動解析のための機械学習ポテンシャルの構築
日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会
東京都立大学南大沢キャンパス (2025.3.8-10) No.P98 (Poster)
大芝颯太、三津原晟弘、君塚肇
13. 設計的合成のためのハイスループット計算によるゼオライトの原子配列解析
化学工学会第 90 年会
東京理科大学葛飾キャンパス (2025.3.12-14) No.L214 (Invited)
村岡恒輝
14. ゼオライトインターグロースの網羅的探索とその合成
化学工学会第 90 年会
東京理科大学葛飾キャンパス (2025.3.12-14) No.L218 (Oral)
大石宏太、村岡恒輝、伊與木健太、脇原徹、大久保達也、中山哲
15. ジフェニル DNTT 異性体における電荷輸送特性の違いと動的無秩序の影響
第 72 回応用物理学会春季学術講演会
東京理科大学野田キャンパス&オンライン (2025.3.14-17)
No.17p-K404-7 (Oral)
Bulgarevich Dmitrievich Kirill、瀧宮和男
16. DFT-MD シミュレーションを用いた MoO_x 担持金属触媒の選択的水素化分解反応
に関する理論的研究
第 135 回触媒討論会
大阪大学豊中キャンパス (2025.3.18-19) No.1P42 (Poster)
竹井健真、池田龍志、村岡恒輝、中川善直、富重圭一、中山哲

17. ゲルネットワークの異常バタフライパターンを調べるための大規模粗視化 MD 計算
日本物理学会 2025 年春季大会
オンライン (2025.3.18-21) No.19pM1-13 (Oral)
萩田克美、村島隆浩
18. 計算物質科学分野の博士人材の育成動向の推定法の構築—研究分野の判別への大規模言語モデルの活用—
日本物理学会 2025 年春季大会
オンライン (2025.3.18-21) No.21aN1-13 (Oral)
寺田弥生
19. 固体潤滑・境界潤滑の分子シミュレーション
2024 年度第 1 回固体潤滑研究会
東工大蔵前会館、東京科学大学大岡山キャンパス (2025.3.21)
No.講演 1 (Oral)
桑原卓哉
20. Synthesis and Properties of Semiconducting Polymers Incorporating Quinoidal Benzodichalcogenophenediones
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[F]2201-4am-01 (Oral)
Kohsuke Kawabata, Shohei Wada and Kazuo Takimiya
21. 3-ジシアノメチレンベンゾカルコゲノフェン構造で終端した非フラーレンアクセプターの電子構造と太陽電池特性
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[F]2203-2am-04 (Oral)
柴橋健亮、中村真人、川畑公輔、瀧宮和男
22. キノイド型ナフトジピロリドン骨格を有する可溶性有機半導体オリゴマーの合成と物性
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[F]2203-2am-05 (Oral)
栗田駿之介、川畑公輔、瀧宮和男

23. グランドカノニカルモンテカルロ法におけるつり合いを満たす挿入削除バイアス法の開発と機械学習ポテンシャルへの適用
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[C]C302-3am2-04 (Oral)
池田龍志、菅野智也、中山哲
24. グラフを用いた結晶構造識別子の厳密性と頑強性に関する研究
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[C]C302-2vn-04 (Oral)
谷本拓、村岡恒輝、宗形翼、中山哲
25. 勾配ブースティング決定木による多元素ナノ合金の状態密度予測
日本化学会第 105 春季年会(2025)
関西大学千里山キャンパス (2025.3.26-29) No.[C]C302-3vn-06 (Oral)
難波優輔、古山通久

V. 新聞記事

<2024 年>

1. 化学反応はどう起こっているのか？—世界初、量子力学方程式に関する実験パラメータなしの数値解析に成功—（川添 PJ）
東北大学未来科学技術共同研究センター プレスリリース (2024.6.3)
川添良幸、佐原亮二、大野かおる
<https://www.niche.tohoku.ac.jp/?p=7798>
2. 耐熱材料のコーティング材密着性向上—添加元素の役割を初めて明らかに—
東京大学大学院新領域創成科学研究科 プレスリリース (2024.8.30)
根上将大、森橋遼、吉野哲生、佐原亮二、御手洗容子
<https://www.k.u-tokyo.ac.jp/information/category/press/11117.html>

VI. 学位取得

<博士>

1. ホランダイト型二酸化マンガンをにおけるアルカリ金属イオンとアルカリ土類金属イオンの共挿入挙動に関する研究

東北大学大学院 工学研究科 金属フロンティア工学専攻
斉悦

2. 光ポンププローブ法を用いた複雑な異種
東京大学 工学系研究科 機械工学専攻

Rulei Guo

<修士>

1. ジベンゾジカルコゲノペンタレンを基盤とする有機半導体の分子設計

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
井上将志

2. キノイド型ナフトジフランジオン骨格を有するドナーアクセプター型高分子の開発

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
佐伯道太郎

3. メチルチオ化縮合多環芳香族化合物のモジュラー合成：メチルチオ基導入と縮環骨格形成への効率的アプローチ

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
新開陽介

4. 蛍光性ジピリンナノチェーンの光輸送機構の解明と機能開拓

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 錯体化学研究室
谷口晴

5. リチウム金属負極における多価カチオン添加の電解液濃度依存性に関する研究

東北大学大学院 工学研究科 金属フロンティア工学専攻
靳栄康

<学士>

1. First-Principles Investigation of Defect Structures at the Ferrite/Cementite Interface Using Density Functional Theory

横浜国立大学 理工学部 数物・電子情報系学科

加藤慧介

VII. 書籍

<2024 年>

1. 『Analysis of Silicon Steel by Ab Initio and Phase Field Calculation』
“K. Fujisaki (ed.), Handbook of Magnetic Material for Motor Drive Systems”
Springer-Verlag (2025.2.20) Chapter19, pp.1-26
Kaoru Ohno and Ryoji Sahara
https://doi.org/10.1007/978-981-19-9644-3_19-1#DOI

VIII. 表彰

1. 『多元素材料の熱力学的安定配置探索のための Wang-Landau アルゴリズムの実装と多元合金ナノ粒子への応用』
日本コンピュータ化学会
2023 年度 吉田賞（論文賞）（2024.6.7）
難波優輔、古山通久
2. 『マルチスケール計算化学に基づくエネルギー・物質変換界面に関する研究』
公益社団法人 化学工学会
2024 年度(令和 6 年度)化学工学会賞
研究賞【玉置明善記念賞】（2024）
古山通久
3. 『Ru-Mo-W 合金単結晶線材の特性に及ぼす不純物元素の影響』
日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会
第 43 回優秀ポスター賞 (2024.9.19)
米村虎太郎、村上力輝斗、糸井椎香、鎌田圭、堀合毅彦、花田貴、山路晃広、
吉野将生、佐藤浩樹、大橋雄二、黒澤俊介、横田有為、吉川彰

IX. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員209
2. 東北大学金属材料研究所構内図210
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図211