

2022 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

(2022 年 4 月～2023 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

<2022 年>

1. 高圧下水素化合物高温超伝導体の理論研究 1
東京大学先端科学技術研究センター 有田亮太郎
2. Exploration of High Entropy Cathode Material for Lithium-Ion Battery 4
Shinshu University Kaoru Hisama, Tien Quang Nguyen, Attila Taborosi, Nobuyuki Zettsu and Michihisa Koyama
3. Chemical domain structure and its formation kinetics in CrCoNi medium-entropy alloy 7
大阪大学大学院基礎工学研究科 尾方成信
4. 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 9
信州大学先鋭材料研究所 古山通久
5. 単層 CNT の構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション 12
東京大学機械工学専攻 小幡郁真、丸山茂夫
6. トポロジカル系における新奇量子相とダイナミクス 14
東京大学大学院理学系研究科 藤堂眞治、諏訪秀磨

7. 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…………… 17
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
8. 界面や欠陥近傍における原子やイオンの伝導機構の解析…………… 22
東京大学工学系研究科 清水康司、渡邊聡
9. FMO 計算に基づく有効パラメータを用いる DPD シミュレーション…………… 25
立教大学理学部 望月祐志、奥脇弘次、土居英男
10. バナジウム系合金水素化物の局所構造と水素吸蔵放出特性のサイクル劣化機構…………… 30
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 池田一貴
11. 実空間計算手法を用いた複雑磁気構造系の輸送特性の研究…………… 32
東京大学先端科学技術研究センター 野本拓也
12. First-principles calculations of α -G2O3 structural and electronic properties…………… 33
Institute of Laser Engineering, Osaka University Jessiel Siaron Gueriba and Kohei Yamanoi
Institute of Materials Research, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe, Isao Takahashi and
Akira Yoshikawa
13. 第一原理計算に基づく多バンド少数キャリア系の電子・フォノン状態と超伝導…………… 36
新潟大学理学部 大野義章
新潟大学自然科学研究科 関川卓也、猪熊祐輔、川井弘之、伊海田陸、王宇、森田経介
14. Studies on the Correlation between Structures, Properties and Reactivity of Cluster Complexes…………… 42
豊田工業大学 市橋正彦、安松久登
九州大学大学院理学研究院 寺寄亨、荒川雅
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
15. 有機/無機半導体界面の構造と電子状態 (Geometric and electronic structure of the interface
between organic and inorganic semiconductors)…………… 44
京都大学理学研究科 有賀哲也

16. 結晶粒子形状制御のための表面安定性解析 46
信州大学先鋭材料研究所 宮川博夫、山田哲也、手嶋勝弥
17. COHERENT DIFFRACTION IMAGING OF NANO MATERIALS BY A TABLE-TOP XUV
SOURCE 50
Attosecond Science Research Team, RIKEN Center for Advanced Photonics Giang Tran and
Katsumi Midorikawa
18. 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 55
京都大学大学院工学研究科 Mayank Dixit、Takeshi Sato、Takashi Taniguchi
19. First-principles study electron transport of the $\text{MASnI}_3/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ interface 59
Kyushu University Qing Wang, Koji Miyazaki and Satoshi Iikubo
20. 水酸アパタイトの摩耗素過程の分子動力学解析 64
長岡技術科学大学 Pham Ding Dat、Yuichi Otsuka
21. アルミニウム合金における溶質原子の偏析・クラスター化の原子論的解析 66
名古屋大学工学研究科 君塚肇
22. A study on oxidation initiation mechanism of hydrogen containing alloy surfaces under strain 69
National Institute of Technology, Sendai College Nishith K. Das
23. 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 72
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
24. 金属一析出物間の非整合界面における水素トラップエネルギーの第一原理計算 76
日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 山口正剛
25. 材料メソ領域におけるマイクロボイドがバルク特性に与える影響 79
横浜国立大学大学院環境情報研究院 松井和己
26. 有機半導体固体の構造特性の予測と分析 83
東北大学大学院理学研究科 瀧宮和男、川畑公輔

27. 第一原理ハイスループット計算に基づく物質設計…………… 88
 東北大学理学研究科 是常隆
28. 新材料系クアドロペロブスカイト酸化物の第一原理計算を用いた電子・磁気構造の起源解明…………… 90
 東北大学工学研究科応用化学専攻 神永健一
29. 生体適合性材料 MPC の水和を制御するファンデルワールス相互作用…………… 93
 東北大学大学院理学研究科物理学専攻 高橋まさえ
30. 界面和周波発生分光の理論解析に基づく溶液界面構造と反応の微視的解明…………… 97
 東北大学大学院理学研究科 森田明弘、伊藤大晟、仲海渡、上村哲平
 富山大学大学院理工学研究部 石山達也
31. 第一原理計算に基づくミディアムエントロピー合金の組織シミュレーション…………… 99
 東北大学多元物質科学研究所 榎木勝徳
 豊田理化学研究所 大谷博司
32. 分子動力学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……………102
 東北大学大学院工学研究科 久保正樹、斎藤高雅、竹林遼
33. 液体核変換ターゲット開発に向けた機械学習分子動力学計算手法の適用性評価……………105
 東北大学大学院工学研究科 宋戸博紀、軒天太
34. デュアルカチオン電解液におけるアルカリ金属負極の dendrite 成長抑制機構の解明 ……108
 東北大学金属材料研究所 李弘毅、葉夏桐、市坪哲
35. $M_{23}X_6$ 型金属間化合物の力学特性に及ぼす化学組成の影響…………… 110
 東北大学金属材料研究所 笠田竜太、水元希、松戸玲菜、陣場優貴
 熊本大学 松川義孝
 JAEA 鈴木知明
36. 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…………… 112
 東北大学金属材料研究所 小無健司、松尾悟
37. 電子ビーム積層造形におけるファイヤーワークス現象の研究…………… 114
 東北大学金属材料研究所 青柳健大

38. Atomistic simulation of grain boundary segregation in a quinary concentrated solid-solution alloy 116
Institute for Materials Research, Tohoku University Jiaxiang Li, Kenta Yamanaka and
Akihiko Chiba
39. 高水素配位錯イオンの動的挙動 121
東北大学金属材料研究所 高木成幸
40. 任意の電子励起固有状態に適用可能な TOMBO の開発・普及 125
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、Mohammad 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
41. 第一原理シミュレーション計算による有機金属構造体マテリアルズインフォマティクス 128
東北大学大学院医工学研究科 松木英敏
42. 第一原理計算と機械学習による高信頼性構造材料設計 133
NIMS 佐原亮二、A. Manjanath、A. Saengdeejing、大塚秀幸
KIST 水関博志
東北大学 川添良幸
IISER P. Ghosh、K. Kohli、C. Pallavi
Brunel University London M. Souissi
IIS Bangalore A. K. Singn、S. Sucheta
University of Danang V. Bui
43. 第一原理計算を用いた磁歪定数の符号に及ぼすスピナー軌道相互作用の影響の解明 136
東北大学金属材料研究所 梅津理恵
44. Ultimate Impedance of Coherent Heat Conduction in van der Waals Graphene-MoS₂ Heterostructures 140
Department of Physics, Yunnan University Shiqian Hu
Department of Mechanical Engineering, the University of Tokyo Junichiro Shiomi
45. Re 系錯体水素化物のイオン伝導特性 145
東北大学金属材料研究所 高木成幸
Gwangju Institute of Science and Technology Sangryun Kim

46. 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 147
 東北大学金属材料研究所計算物質科学人材育成コンソーシアム 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
 熊本大学大学院自然科学研究科 連川貞弘、白坂仁
 東北大学大学院工学研究科 吉見享祐、金子昂弘、星崎航太郎
 東北大学工学部材料科学総合学科 齋藤桃子
 東北大学金属材料研究所 宮本吾郎、鄭伯豪
47. STRUCTURAL DESIGN AND THERMODYNAMIC STABILITY EVALUATION OF NEW FUNCTIONAL NANOMATERIALS 153
 Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov
48. 材料複合系の機能発現・劣化・破壊メカニズムの大規模分子動力学シミュレーション解析 157
 東北大学金属材料研究所 尾澤伸樹、大谷優介、浅野優太、許競翔、王楊、陳茜、高橋昭、中村美穂、渡辺瑛奈子、星野有紀、蘇怡心、川浦正之、趙コウヨ、渡部祥、大槻陸、中村哲也、横井瑞穂、石川立、工藤龍太郎、千葉ありさ、久保百司
49. High-precision free energy calculation and full first-principles phase diagram 162
 Tohoku University, Japan Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey and Zihao Wang
 National Institute for Materials Science (NIMS), Japan Qinqiang Zhang and Mariko Kadowaki
 Beijing University of Science and Technology, China Lei Wang
 Shanghai University, China Hao Wang
 Institute of Fluid Physics, China Hua Y. Gneg
 NIMTE, Chinese Academy of Sciences, China Hubin Luo
 Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia Ivan Štich and Jan Brndiar
50. 磁気構造の予測・解析手法と磁性体の物性現象の研究 167
 東北大学金属材料研究所 鈴木通人
51. 高信頼性第一原理シミュレーション計算によるマテリアルインフォマティクスを用いた新単結晶材料探索 169
 東北大学未来科学技術共同研究センター 佐藤浩樹

52. 原子論的シミュレーションによる超潤滑膜のその場形成メカニズムの解明……………174
大阪公立大学工学研究科 桑原卓哉
53. 固体酸化物形燃料電池のアノードにおける電子の非局在化に及ぼす Fe^{2+} および Fe^{3+} 元素のドーピングによる欠陥構造の変化の影響……………177
国立高専機構鶴岡工業高等専門学校 伊藤滋啓
Yanshan University (燕山大学) Ke Tong
Southern University of Science and Technology (南方科技大学) Fei Ye
54. 光起電力デバイスの電荷移動メカニズム……………181
日本女子大学理学部 村岡梓、大森鈴音、峰下恵、馬場唯花、藤原成美、南柚香、小暮紗奈、林美貴、水越琴乃、森下裕未、山田芽依、吉田華乃香
55. Computer Simulation on Fast Ion Conductors for All-Solid-State-Battery ……………186
WPI-Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University, Mathematics for Advanced Materials Open Innovation Laboratory (MathAM-OIL), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),
Institute for Materials Research (IMR), Tohoku University Kartik Sau, Tamio Ikeshoji and Shigeyuki Takagi
56. Ab initio calculations to estimate the strength of two-phase interface in carbon steels ……………190
Yokohama National University S. Aoki, S. Aoki, S. Bae, K. Matsui and H. Raebiger
57. 3 nm 以下の金属酸化物ナノ粒子の特異な構造物性に関する第一原理計算 ……………193
名古屋大学 高見誠一
東北大学 横哲
58. 分子クラスターイオンの振動前期解離ダイナミクス……………197
東北大学大学院理学研究科化学専攻 菅野学、小柴拓実
59. 放射性同位元素アクチニウムの計算科学的手法による錯体構造解析及び安定度評価……………200
東北大学金属材料研究所 白崎謙次
東京工業大学科学技術創成研究院 中瀬正彦

60. Molecular dynamics to investigate surface diffusion of phase-separating metals.....203
INSA-Lyon CNRS Pierre-Antoine Geslin
IMR, Tohoku University Hidemi Kato
61. ランタノイド元素の X 線吸収スペクトルと局所構造に関する検討206
近畿大学理工学部 朝倉博行
62. Understanding Electrocatalysis by Atomistic Simulations and Machine Learning209
Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR) Hao Li
63. Theoretical analysis of the role of neutral molecules in metal hydride ionic conductors212
Advanced Institute for Materials Research (AIMR) Egon Campos Dos Santos
64. High power dynamics study in synthetic antiferromagnets216
WPI-AIMR, Tohoku University Aakanksha Sud, Hidekazu Kurebayashi and
Shigemi Mizukami
65. フォノンエンジニアリングを用いた二次元ヘテロ構造の熱伝導制御219
東京大学機械工学専攻 濱川登夢、大西正人、塩見淳一郎
66. Ultimate Suppression of Nanoscale Heat Transport with Quasi-phononic Crystal222
University of California at Los Angeles Liao Yuxuan
The University of Tokyo Masato Ohnishi
67. A preliminary study on molecular dynamics simulation of single-layer graphene vibrations.....225
Department of Frontier Sciences for Advanced Environment Graduate School of Environmental
Studies Tohoku University Fumio Narita and Zhenjin Wang
68. 第一原理電子状態計算による化学反応過程の研究227
大阪大学大学院工学研究科 Van An DINH、Thanh Ngoc PHAM、
Yuelin WANG、Harry Handoko HALIM、John Isaac ENRIQUEZ、
Beatriz Andrea Choi TAN、濱本雄治、濱田幾太郎、森川良忠

II. 原著論文

<2021 年>

1. Effect of Pore Size of Carbon Support on Electrode Reaction Activity of Catalyst Layer in Polymer Electrolyte Fuel Cell: Reactive Molecular Dynamics Simulations.....229
J. Comput. Chem. Jpn., 20[4] (2021) pp.150-154
Tetsuya Nakamura, Riku Otsuki, Shuichi Uehara, Yuta Asano, Qian Chen, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

<2022 年>

1. Supervised deep learning prediction of the formation enthalpy of complex phases using a DFT database: The σ -phase as an example.....234
Comput. Mater. Sci., 201 (2022) Art.No.110864
Jean-Claude Crivello, Jean-Marc Joubert and Nataliya Sokolovska
2. Heterogeneous Enantioselective Hydrogenation of Ketones by 2-Amino-2'-hydroxy-1,1'-binaphthyl-Modified CeO₂-Supported Ir Nanoclusters241
ACS Catal., 12[2] (2022) pp.868-876
Masazumi Tamura, Nao Hayashigami, Akira Nakayama, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige
3. Electronegativity Difference as a Descriptor for the Oxidation-Inhibiting Effect of the Alloying Element during the Early Stages of Titanium Oxidation250
Langmuir, 38[4] (2022) pp.1448-1457
Kanika Kohli, Somesh Kr. Bhattacharya, Kyosuke Ueda, Takayuki Narushima, Ryoji Sahara and Prasenjit Ghosh
4. Second-harmonic generation in atomically thin 1T-TiSe₂ and its possible origin from charge density wave transitions260
Phys. Rev. B, 105[8] (2022) Art.No.085409
Ruiming Zhang, Wei Ruan, Junyao Yu, Libo Gao, Helmuth Berger, László Forró, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Ahmad Ranjbar, Rodion V. Belosludov, Thomas D. Kühne, Mohammad Saeed Bahramy and Xiaoxiang Xi

5. Noble-Metal High-Entropy-Alloy Nanoparticles: Atomic-Level Insight into the Electronic Structure 269
 J. Am. Chem. Soc., 144[8] (2022) pp.3365-3369
 Dongshuang Wu, Kohei Kusada, Yusuke Nanba, Michihisa Koyama, Tomokazu Yamamoto,
 Takaaki Toriyama, Syo Matsumura, Okkyun Seo, Ibrahima Gueye, Jaemyung Kim,
 Loku Singgapulige Rosantha Kumara, Osami Sakata, Shogo Kawaguchi, Yoshiki Kubota and
 Hiroshi Kitagawa

6. Deoxydehydration of Biomass-Derived Polyols Over Silver-Modified Ceria-Supported Rhenium Catalyst
 with Molecular Hydrogen 274
 ChemSusChem, 15[10] (2022) Art.No.e202102663
 Kosuke Yamaguchi, Ji Cao, Mii Betchaku, Yoshinao Nakagawa, Masazumi Tamura,
 Akira Nakayama, Mizuho Yabushita and Keiichi Tomishige

7. Why the Photochemical Reaction of Phenol Becomes Ultrafast at the Air-Water Interface: The Effect
 of Surface Hydration 282
 J. Am. Chem. Soc., 144[14] (2022) pp.6321-6325
 Tatsuya Ishiyama, Tahei Tahara and Akihiro Morita

8. Collective Effect of Transformation of a Hydrogen Bond Network at the Initial State of Growth of
 Methane Hydrate 287
 JETP Lett., 115[3] (2022) pp.124-129
 V. R. Belosludov, K. V. Gets, R. K. Zhdanov, Yu. Yu. Bozhko, R. V. Belosludov and L.-J. Chen

9. Boundary effects and quadrupole contribution in sum frequency generation spectroscopy 293
 J. Chem. Phys., 156[15] (2022) Art.No.154109
 Tomonori Hirano and Akihiro Morita

10. Studying Electronic and Thermoelectric Properties of Ga-doped ZnO using Rigid Band Model 305
 Arabian J. Sci. Eng., 48 (2023) pp.721-725
 Hieu T. Hoang, Dai Cao Truong, Nguyen Huynh Tuan Anh, Yoshiyuki Kawazoe,
 Do Duc Cuong and Bach Thang Phan

11. Ring mechanism of fast Na⁺ ion transport in Na₂LiFeTeO₆: Insight from molecular dynamics
 simulation 310
 Phys. Rev. Materials, 6[4] (2022) Art.No.045406
 Kartik Sau and Tamio Ikeshoji

12. Mechanical properties of samarium cobalt: A molecular dynamics study322
Mater. Today Commun., 31 (2022) Art.No.103676
Zhen Zhao, Haoyang Zhao, Hubin Luo, Lei Liu, Yong Ding, Xiangyu Zhang, Xiaohong Yao and Jian Zhang

13. Effects of Conformation on Doping Efficiency in π -Extended Bipyranlydene Molecules: Relationship between Molecular Structure and Electron-Doping Ability for Developing n-Type Organic Thermoelectrics 330
Bull. Chem. Soc. Jpn., 95[7] (2022) pp.1047-1053
Takaya Matsuo, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya

14. Quantum and temperature effects on the crystal structure of superhydride LaH₁₀: A path integral molecular dynamics study337
Phys. Rev. B, 105[17] (2022) Art.No.174111
Yuta Watanabe, Takuya Nomoto and Ryotaro Arita

15. Thermodynamic stability of Pd-Ru alloy nanoparticles: combination of density functional theory calculations, supervised learning, and Wang-Landau sampling343
Phys. Chem. Chem. Phys., 24[25] (2022) pp.15452-15461
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama

16. Dendrite-free alkali metal electrodeposition from contact-ion-pair state induced by mixing alkaline earth cation353
Cell Rep. Phys. Sci., 3[6] (2022) Art.No.100907
Hongyi Li, Masaki Murayama and Tetsu Ichitsubo

17. First-Principles Study of the RKKY Interaction and the Quadrupole Order in the Pr 1-2-20 Systems PrT₂Al₂₀ (T = Ti, V)372
J. Phys. Soc. Jpn., 91[7] (2022) Art.No.074708
Yuto Iizuka, Takemi Yamada, Katsurou Hanzawa and Yoshiaki Ōno

18. All-proportional solid solution versus two-phase coexistence in the Ti-V alloy by first-principles phase field and SQS methods378
Sci. Rep., 12 (2022) Art.No.10070
Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Thi Nu Pham, Swastibrata Bhattacharyya and Ryoji Sahara

19. Extended quasiparticle approach to non-resonant and resonant X-ray emission spectroscopy391
 Phys. Chem. Chem. Phys., 24[27] (2022) pp.16586-16595
 Kaoru Ohno and Tsubasa Aoki
20. Anomalous Efficient Dehydrogenation of NH₃ on Ir₄⁺ and Ir₅⁺401
 J. Phys. Chem. A, 126[27] (2022) pp.4451-4455
 Shinichi Hirabayashi and Masahiko Ichihashi
21. 1,3,6,8-Tetrakis(methylchalcogeno)pyrenes: Effects of Chalcogen Atoms on the Crystal Structure and Transport Properties406
 Chem. Mater., 34[14] (2022) pp.6606-6616
 Kirill Bulgarevich, Shingo Horiuchi, Takuya Ogaki and Kazuo Takimiya
22. Reaction Mechanism of Deoxydehydration by Ceria-Supported Monomeric Rhenium Catalysts: A Computational Study417
 J. Phys. Chem. C, 126[28] (2022) pp.11566-11573
 Ryu Hosaka, Daiki Asada, Ji Cao, Masazumi Tamura, Yoshinao Nakagawa, Keiichi Tomishige, Jun-ya Hasegawa and Akira Nakayama
23. Development of the Bethe-Salpeter method considering second-order corrections for a *GW* electron-hole interaction kernel425
 Phys. Rev. B, 106[4] (2022) Art.No.045113
 Satoka Yamada, Yoshifumi Noguchi, Kohei Ishii, Daichi Hirose, Osamu Sugino and Kaoru Ohno
24. Insights of cationic diffusion in nickel-based honeycomb layered tellurates using molecular dynamics simulation438
 Solid State Ionics, 383 (2022) Art.No.115982
 Kartik Sau and Tamio Ikeshoji
25. What Defines a Crystal Structure? Effects of Chalcogen Atoms in 3,7-Bis(methylchalcogeno)benzo[1,2-*b*:4,5-*b'*]dichalcogenophene-Based Organic Semiconductors448
 Chin. J. Chem., 40[21] (2022) pp.2546-2558
 Kazuo Takimiya, Kirill Bulgarevich, Kamon Sahara, Kiseki Kanazawa, Hiroyuki Takenaka and Kohsuke Kawabata

26. Artificial neural network-based path integral simulations of hydrogen isotope diffusion in palladium·····461
 J. Phys. Energy, 4[3] (2022) Art.No.034004
 Hajime Kimizuka, Bo Thomsen and Motoyuki Shiga
27. Density functional theory study of NO-H₂O coadsorption on Cu(111)·····474
 Phys. Rev. Materials, 6[7] (2022) Art.No.075801
 Thanh Ngoc Pham, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
28. Influences of multicenter bonding and interstitial elements on pseudo-twinned γ -TiAl crystal ·····487
 Phys. Scr., 97[8] (2022) Art.No.085403
 Jianxin Huang, Jinkai Wang, Hao Wang, Jiajun Lu, Xiao-Gang Lu, Jun Jiang and Ying Chen
29. Tunable uniaxial, area, and volume negative thermal expansion in quartz-like and diamond-like metal-organic frameworks ·····497
 RSC Adv., 12[34] (2022) pp.21770-21779
 Lei Wang, Ying Chen, Hideo Miura, Ken Suzuki and Cong Wang
30. Effects of the rigid and sterically bulky structure of non-fused nonfullerene acceptors on transient photon-to-current dynamics····· 507
 J. Mater. Chem. A, 10[37] (2022) pp.20035-20047
 Seihou Jinnai, Kasumi Murayama, Keisuke Nagai, Megumi Mineshita, Kosaku Kato, Azusa Muraoka, Akira Yamakata, Akinori Saeki, Yasuhiro Kobori and Yutaka Ie
31. Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm-Star Block Copolymer Blends····· 520
 Macromolecules, 55[18] (2022) pp.8021-8031
 Katsumi Hagita, Takahiro Murashima and Toshihiro Kawakatsu
32. Surface electronic structure of possible high- T_c surface superconductor WO₃ based on the first-principles calculation ·····531
 J. Phys. Conf. Ser., 2323 (2022) Art.No.012006
 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai and Yoshiaki Ōno

33. Structure, electric transport, and magneto-transport properties of metallic double-chain based $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ with low Ca substitution535
Physica B, 646 (2022) Art.No.414226
 Takehiro Teramura, Michiaki Matsukawa, Tatsuya Senzaki, Haruka Taniguchi, Kazuhiro Sano, Yoshiaki Ōno and Makoto Hagiwara
34. Using neural network potentials to study defect formation and phonon properties of nitrogen vacancies with multiple charge states in GaN 543
Phys. Rev. B, 106[5] (2022) Art.No.054108
 Koji Shimizu, Ying Dou, Elvis F. Arguelles, Takumi Moriya, Emi Minamitani and Satoshi Watanabe
35. Chemical domain structure and its formation kinetics in CrCoNi medium-entropy alloy 549
Acta Mater., 240 (2022) Art.No.118314
 Jun-Ping Du, Peijun Yu, Shuhei Shinzato, Fan-Shun Meng, Yuji Sato, Yangen Li, Yiwen Fan and Shigenobu Ogata
36. Emergence of Different Replica Dirac Cones and Intra- and Intervalley Scatterings in Short-Wavelength Graphene Superlattices Modulated by an Atomic-Scale Sharp Potential 560
J. Phys. Chem. C, 126[36] (2022) pp.15415-15423
 Nam Hoang Vu, Hieu Van Le, Thang Bach Phan, Nam Thoai, Toan The Nguyen, Hung Minh Le, Yoshiyuki Kawazoe and Thi Minh Cao
37. Ultrafine nanoporous intermetallic catalysts by high-temperature liquid metal dealloying for electrochemical hydrogen production 569
Nat. Commun., 13 (2022) Art.No.5157
 Ruirui Song, Jiuhui Han, Masayuki Okugawa, Rodion Belosludov, Takeshi Wada, Jing Jiang, Daixiu Wei, Akira Kudo, Yuan Tian, Mingwei Chen and Hidemi Kato
38. Simultaneous and sequential transformations with nucleation at preferred sites 581
Tecnol. Metal., Mater. Min., 19 (2022) Art.No.e2736
 André Luiz Moraes Alves, Felipe da Silva Siqueira and Paulo Rangel Rios

39. Penta-OsP₂ and penta-Rhs₂ sheets derived from marcasite and pyrite with low lattice thermal conductivity587
 J. Mater. Chem. A, 10[40] (2022) pp.21356-21367
 Yiheng Shen, Jie Sun, Yanyan Chen, Dongyuan Ni, Tingwei Li, Akira Yoshikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Qian Wang
40. Theoretical Study on the Reaction Mechanism of the Water-Splitting Process on Cobalt Oxide Catalysts 599
 J. Comput. Chem. Jpn., 21[2] (2022) pp.45-47
 Narumi Fujiwara, Koichi Yamashita and Azusa Muraoka
41. Definition of Atomic-Scale Contact: What Dominates the Atomic-Scale Friction Behaviors?602
 Langmuir, 38[38] (2022) pp.11699-11706
 Yang Wang, Jie Qin, Jingxiang Xu, Junhui Sun, Lei Chen, Linmao Qian and Momoji Kubo
42. Rotation of complex ions with ninefold hydrogen coordination studied by quasielastic neutron scattering and first-principles molecular dynamics calculations610
 Phys. Rev. Research, 4[3] (2022) Art.No.033215
 Yoshinori Ohmasa, Shigeyuki Takagi, Kento Toshima, Kaito Yokoyama, Wataru Endo, Shin-ichi Orimo, Hiroyuki Saitoh, Takeshi Yamada, Yukinobu Kawakita, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, Hiroshi Akiba and Osamu Yamamuro
43. Effect of Water and Oxygen at Sliding Interface on Friction and Wear of Diamond-like Carbon/Steel: Reactive Molecular Dynamics Simulations619
 J. Comput. Chem. Jpn., -Int. Ed., 8 (2022) Art.No.2022-0009
 Mizuho Yokoi, Masayuki Kawaura, Yuta Asano, Qian Chen, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
44. Development of efficient computational analysis of difference infrared and Raman spectroscopies624
 J. Chem. Phys., 157[12] (2022) Art.No.124105
 Tomonori Hirano, Naoya Yazawa, Lin Wang and Akihiro Morita
45. オンサイトとオンラインのコンピュータ実習付きセミナーの有効性－計算物質科学人材育成コンソーシアムの取組を例としたケーススタディー637
 工学教育研究講演会講演論文集, 2022 (2022) pp.156-157
 寺田弥生

46. The negative thermal expansion behavior in Prussian blue analogue $Zn_3[Fe(CN)_6]_2$: A first-principles study639
Phys. Lett. A, 453 (2022) Art.No.128493
Yaning Sun and Lei Wang
47. Substantial Effect of Terminal Groups in *cis*-Polyisoprene: A Multiscale Molecular Dynamics Simulation Study646
Macromolecules, 55[21] (2022) pp.9650-9662
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
48. Anharmonic Interaction in Negative Thermal Expansion Material $CaTiF_6$ 659
Inorg. Chem., 61[43] (2022) pp.17378-17386
Lei Wang, Ying Chen, Jun Ni, Feng Ye and Cong Wang
49. Position Dependent Dielectric Function Near the Cu Surface668
J. Phys. Soc. Jpn. (Lett.), 91[11] (2022) Art.No.113703
Yuki Sakamoto, Katsushi Fujii, Shinichiro Nakamura and Kaoru Ohno
50. Structural Symmetry and Spin Multiplicity of Sumanene Derivative Radical Molecules672
J. Comput. Chem. Jpn., 21[2] (2022) pp.55-57
Yuika Baba, Hidehiro Sakurai and Azusa Muraoka
51. Penta-graphene and phagraphene: thermal expansion, linear compressibility, and Poisson's ratio675
J. Phys.: Condens. Matter, 34[50] (2022) Art.No.505301
Lei Wang, Ying Chen, Hideo Miura, Ken Suzuki and Cong Wang
52. Disorder in Fe_3Ga alloy of $D0_3$ structure: Effect on stability and magnetostriction686
Comput. Mater. Sci., 216 (2023) Art.No.111878
Talgat Inerbaev, Aisulu Abuova, Alma Dauletbekova, Yoshiyuki Kawazoe and Rie Umetsu
53. Full Temperature-Dependent Potential and Anharmonicity in Metallic Hydrogen: Colossal NQE and the Consequences693
J. Phys. Chem. C, 126[45] (2022) pp.19355-19366
Hua Y. Geng

54. Axial-Bonding-Driven Dimensionality Effect on the Charge-Density Wave in NbSe₂705
 Nano Lett., 22[23] (2022) pp.9389-9395
 Dongjing Lin, Ahmad Ranjbar, Xiaoxia Li, Xinyu Huang, Yuan Huang, Helmuth Berger,
 László Forró, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Rodion V. Belosludov, Thomas D. Kühne,
 Haifeng Ding, Mohammad Saeed Bahramy and Xiaoxiang Xi
55. Large second harmonic generation in a penta-CdO₂ sheet exfoliated from its bulk phase712
 J. Mater. Chem. A, 11[1] (2023) pp.167-177
 Changsheng Hou, Yiheng Shen, Qian Wang, Y. Kawazoe and P. Jena
56. Van der Waals interactions regulating the hydration of 2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine, the
 constructing monomer of biocompatible polymers723
 Sci Rep., 12 (2022) Art.No.20393
 Masae Takahashi, Sifan Chen, Hiroshi Matsui, Nobuyuki Morimoto and Yuka Ikemoto
57. Density Functional Theory Study of Deoxydehydration Reaction by TiO₂-Supported Monomeric and
 Dimeric Molybdenum Oxide Catalysts735
 J. Phys. Chem. C, 126[48] (2022) pp.20375-20387
 Daiki Asada, Tatsushi Ikeda, Koki Muraoka, Yoshinao Nakagawa, Keiichi Tomishige and
 Akira Nakayama
58. Heterogeneous molecular Co-N-C catalysts for efficient electrochemical H₂O₂ synthesis748
 Energy Environ. Sci., 16 (2023) pp.446-459
 Chang Liu, Zixun Yu, Fangxin She, Jiayang Chen, Fangzhou Liu, Jiangtao Qu, Julie M. Cairney,
 Chongchong Wu, Kailong Liu, Weijie Yang, Huiling Zheng, Yuan Chen, Hao Li and Li Wei
59. Improving the Oxygen Evolution Activity of Layered Double-Hydroxide via Erbium-Induced
 Electronic Engineering763
 Small, 19[5] (2023) Art.No.2206531
 Yu Zhu, Xuan Wang, Xiaoheng Zhu, Zixin Wu, Dongsheng Zhao, Fei Wang, Dongmei Sun,
 Yawen Tang, Hao Li and Gengtao Fu
60. 第一原理計算による非化学量論 (Ti, TM)C_x(TM = Zr, Nb, Mo)の線形弾性破壊力学に基づく破
 壊靱性値の評価773
 日本学術振興会耐熱金属材料第 123 委員会研究報告, 63[3] (2022) pp.293-305
 星崎航太郎、金子昂弘、井田駿太郎、吉見享祐

61. Molecular dynamics of electric-field driven ionic systems using a universal neural-network potential 786
Comput. Mater. Sci., 218 (2023) Art.No.111955
Kaoru Hisama, Gerardo Valadez Huerta and Michihisa Koyama
62. Uncovered Effects of thieno[2,3-*b*]thiophene Substructure in a Tetrathienoacene Backbone:
Reorganization Energy and Intermolecular Interaction793
Chem. Mater., 35[1] (2023) pp.280-288
Kiseki Kanazawa, Kirill Bulgarevich, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
63. Design of Single-Atom Catalysts for Hg⁰ Oxidation Using H₂O₂.....802
J. Phys. Chem. C, 126[50] (2022) pp.21234-21242
Weijie Yang, Xuelu Chen, Liugang Chen, Yajun Feng, Chongchong Wu, Xunlei Ding,
Zhengyang Gao, Yanfeng Liu and Hao Li
64. Element-wise representations with ECNet for material property prediction and applications in high-
entropy alloys 811
npj Comput. Mater., 8 (2022) Art.No.253
Xinming Wang, Nguyen-Dung Tran, Shuming Zeng, Cong Hou, Ying Chen and Jun Ni
65. Co Effect in the Precipitation Behavior in Cu-Ni-Si Alloy.....821
Journal of Japan Institute of Copper, 61[1] (2022) pp.279-283
Eun-Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi, Jehyun Lee and
Sung Hwan Lim
66. Examining Electrolyte Compatibility on Polymorphic MnO₂ Cathodes for Room-Temperature
Rechargeable Magnesium Batteries826
ACS Appl. Mater. Interfaces, 14[51] (2022) pp.56685-56696
Xiatong Ye, Hongyi Li, Takuya Hatakeyama, Hiroaki Kobayashi, Toshihiko Mandai,
Norihiko L. Okamoto and Tetsu Ichitsubo
67. Mechanism of Friedel-Crafts Acylation Using Metal Triflate in Deep Eutectic Solvents: An
Experimental and Computational Study838
ACS Omega, 8[1] (2023) pp.271-278
Minh-Tam Thi Nguyen, Nghia Le, Hai Truong Nguyen, Tram Diem Vu Luong,
Van Kieu Thuy Nguyen, Yoshiyuki Kawazoe, Phuong Hoang Tran and
Nguyen-Nguyen Pham-Tran

68. Origin of the nucleation preference of coherent and semicoherent nanoprecipitates in Al-Cu alloys based on atomistically informed classical nucleation theory.....846
J. Alloys Compd., 938 (2023) Art.No.168559
Heting Liao, Hajime Kimizuka, Hiroshi Miyoshi and Shigenobu Ogata
69. Construction of maximally-localized Wannier functions using crystal symmetry859
Comput. Phys. Commun., 285 (2023) Art.No.108645
Takashi Koretsune
70. Suzuki hardening and segregation in $\text{Co}_{0.95}\text{Cr}_{0.8}\text{Fe}_{0.25}\text{Ni}_{1.8}\text{Mo}_{0.475}$ high-entropy alloys.....865
Scr. Mater., 226 (2023) Art.No.115260
Jiaxiang Li, Kenta Yamanaka, Yuichiro Hayasaka and Akihiko Chiba
71. Order-disorder competition in equiatomic 3d-transition-metal quaternary alloys: phase stability and electronic structure871
Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods, 3[1] (2023) Art.No.2153632
Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Kenta Hongo
72. Surface states of dual-atom catalysts should be considered for analysis of electrocatalytic activity.....885
Commun. Chem., 6 (2022) Art.No.6
Weijie Yang, Zhenhe Jia, Binghui Zhou, Li Wei, Zhengyang Gao and Hao Li

<2023 年>

1. Generation of modulated magnetic structures based on cluster multipole expansion: Application to α -Mn and CoM_3S_6 892
Phys. Rev. B, 107[1] (2023) Art.No.014407
Yuki Yanagi, Hiroaki Kusunose, Takuya Nomoto, Ryotaro Arita and Michi-To Suzuki
2. Continuous Flow Synthesis of 2-Imidazolidinone from Ethylenediamine Carbamate in Ethylenediamine Solvent over the CeO_2 Catalyst: Insights into Catalysis and Deactivation 907
ACS Catal., 13[3] (2023) pp.1562-1573
Ryotaro Fujii, Mizuho Yabushita, Daiki Asada, Masazumi Tamura,
Yoshinao Nakagawa, Atsushi Takahashi, Akira Nakayama and Keiichi Tomishige
3. Evolution of Weyl-like semi-metallicity in an all- sp^2 carbon allotrope 919
J. Phys. Chem. Solids, 176 (2023) Art.No.111229
Dongyuan Ni, Xiaoyin Li, Wei Sun, Akira Yoshikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Qian Wang
4. Electronic Structure of a Layered Organic-Inorganic Hybrid Material $(\text{WO}_3)_2(4,4'$ -bipyridyl) Based on the First-principles Calculation 926
J. Phys. Soc. Jpn., 92 (2023) Art.No.023702
Takuya Sekikawa, Jeffery L. Tallon, Shen V. Chong and Yoshiaki Ōno
5. Practical compatibility between self-consistent field theory and dissipative particle dynamics 930
Polymer, 269 (2023) Art.No.125733
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
6. DFT calculations of structural, magnetic, and stability of FeNiCo-based and FeNiCr-based quaternary alloys 940
J. Appl. Phys., 133[4] (2023) Art.No.045101
Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey and Ying Chen
7. Variations in the elastic properties and lattice parameters of Mo-Ti and Mo-Cr BCC solid solutions, as estimated by DFT calculations 952
Comput. Mater. Sci, 220 (2023) Art.No.112026
Takahiro Kaneko and Kyosuke Yoshimi

8. Realistic simulation of thermoelectric characteristics of organic semiconductors based on electronic structure calculations960
Appl. Phys. Express, 16[1] (2023) Art.No.011005
Masahiro Ohno, Koji Shimizu and Satoshi Watanabe
9. Electronic structure analysis of light-element-doped anatase TiO₂ using all-electron *GW* approach965
Comput. Mater. Sci., 220 (2023) Art.No.112059
Takashi Ishikawa, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno, Kyosuke Ueda and Takayuki Narushima
10. Identification of Ion Pairs in Aqueous NaCl and KCl Solutions in Combination with Raman Spectroscopy, Molecular Dynamics, and Quantum Chemical Calculations977
J. Phys. Chem. B, 127[7] (2023) pp.1618-1627
Lin Wang, Akihiro Morita, Nicole M. North, Stephen M. Bauml, Elliot W. Springfield and Heather C. Allen
11. Mechanisms of chemical-reaction-induced tensile deformation of an Fe/Ni/Cr alloy revealed by reactive atomistic simulations987
RSC Adv., 13[10] (2023) pp.6630-6636
Yang Wang, Haoyu Zhao, Chang Liu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
12. Design of molecular M-N-C dual-atom catalysts for nitrogen reduction starting from surface state analysis994
J. Colloid Interface Sci., 640 (2023) pp.983-989
Yuefeng Zhang, Zixun Yu, Fangxin She, Li Wei, Zhiyuan Zeng and Hao Li
13. Quantitative Metallographic Parameters to Describe Microstructures of Multiphase Materials..... 1001
Mater. Res., 26 (2023) Art.No.e20220476
André Luiz Moraes Alves, Wesley Luiz da Silva Assis and Paulo Rangel Rios
14. Current Status and Future Scope of Phase Diagram Studies 1008
ISIJ Int., 63[3] (2023) pp.407-418
Masanori Enoki, Satoshi Minamoto, Ikuo Ohnuma, Taichi Abe and Hiroshi Ohtani

15. Microstructures in Iron-rich FeSi Alloys by First-principles Phase Field and Special Quasirandom Structure Methods 1020
ISIJ Int., 63[3] (2023) pp.553-558
Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, Thi Nu Pham, Swastibrata Bhattacharyya,
Yoshiyuki Kawazoe and Keisuke Fujisaki
16. The surface states of transition metal X-ides under electrocatalytic conditions 1026
J. Chem. Phys., 158[12] (2023) Art.No.124705
Heng Liu, Xue Jia, Ang Cao, Li Wei, Carmine D'agostino and Hao Li
17. Study of the peritectic phase transformation kinetics with elastic effect in the Fe-C system by quantitative phase-field modeling 1034
Comput. Mater. Sci, 224 (2023) Art.No.112160
Himanshu Parida, Julia Kundin and Celso Luiz Moraes Alves

III. 国際会議発表論文

< Proceeding >

1. Strain-Induced Change of Adsorption Behaviour of Gas Molecules on Graphene Analyzed by Density Functional Method 1046
Proc. Ser. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 9 (2022)
No.IMECE2022-94892
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Qinqiang Zhang, Ken Suzuki and Lei Wang

2. DFT calculations on BCC-based ordered or disordered Mo-Ti binary alloys 1053
Proc. of Int. Conf. on Refractory Metals and Hard Materials (20th Plansee Seminar 2022), (2022)
pp.RM 81/1-RM81/12
T.Kaneko and K.Yoshimi

3. Dynamical Germ-Grain Models with Ellipsoidal Shape of the Grains for Some Particular Phase Transformations in Materials Science 1065
Conf. proc. 2023, Mathematical Methods for Engineering Applications (ICMASE 2022, Bucharest, Romania, July 4-7), (2023) pp.59-74
Paulo R. Rios, Harison S. Ventura and Elena Villa

<2022 年>

1. ROOM-TEMPERATURE SUPERIONIC CONDUCTION PROMOTED BY PSEUDOROTATING HYDRIDE COMPLEX WITH NINEFOLD HYDROGEN COORDINATION 1081
2nd International Symposium “Hydrogenomics”
online, Japan(2022.5.16-19) (Oral)
S. Takagi and S. Orimo
2. Multi-component sigma-phase database built with the help of high-throughput DFT calculation and supervised machine learning 1082
Calphad XLIX
Stockholm, Sweden(2022.5.22-27) No.O53 (Oral)
J.-C. Crivello, J.-M. Joubert and N. Sokolovska
3. Development of high-strength Cu-Ni-Si alloy based on DFT calculations 1083
Recycling Korea 2022
Jeju, Korea(2022.5.26) (Oral)
E.-A. Choi, S. Z. Han, J. Ahn and S. H. Lim
4. Roles of Interstitial Elements in Anodic Dissolution Resistance of Martensitic Steels 1085
The 7th International Conference on Advanced Steels (ICAS 2022)
Tsukuba, Japan(2022.5.29-1) No.068 (Oral)
Mariko Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Yu Sugawara and Nobuyoshi Hara
5. First-Principles Investigation on the Beneficial Effect of Interstitial Carbon on Steel Corrosion 1086
The 7th International Conference on Advanced Steels (ICAS 2022)
Tsukuba, Japan(2022.5.29-1) No.S3Y04 (Poster)
Mariko Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Yu Sugawara and Nobuyoshi Hara
6. Photoabsorption and Excitation Energy Transfer in Fluorinated Non-Fullerene Acceptors for Organic Solar Cells 1087
241st ECS Meeting
Vancouver, BC, Canada(2022.5.29-6.2) No.B07-0911 (Invited)
Azusa Muraoka

7. Isotope effect on quantum diffusion of interstitial hydrogen in bcc vanadium and fcc palladium 1088
 16th International Workshop on Hydrogen Isotopes in Fusion Reactor Materials (HWS-16)
 Virtual(2022.6.20-22) No.C1 (Oral)
 H. Kimizuka, M.-S. Kim, B. Thomsen and M. Shiga

8. Path integral molecular dynamics study on the *P-T* phase diagram of LaH₁₀ 1089
 Superstripes 2022
 Rome, Italy(2022.6.20-24) (Invited)
 Ryotaro Arita

9. Continuous Tribofilm Formation during SiC Friction: Reactive Force Field Molecular Dynamics Simulation 1090
 7th World Tribology Congress, WTC 2022
 Lyon, France(2022.7.5-10) No.MON-T5-S2-R6 (Oral)
 Masayuki Kawaura, Yang Wang, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

10. Investigation of Defect Behavior near the Interfaces of Au(111)/Li₃PO₄ Using Neural Network Potential 1091
 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI-23)
 Boston, MA, USA(2022.7.17-22) No.DT03.05 (Oral)
 Koji Shimizu, Yasunobu Ando, Emi Minamitani and Satoshi Watanabe

11. Quantum and temperature effects on crystal structure of superhydride LaH₁₀: A path integral molecular dynamics study 1092
 Challenges in designing room temperature superconductors (CDRTS 2022)
 L'Aquila, Italy (2022.7.26-29) (Invited)
 Yuta Watanabe, Takuya Nomoto and Ryotaro Arita

12. Strain-induced Change of Adsorption Behaviour of Gas Molecules on Graphene: A first-principles Study 1093
 the 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM 2022)
 Yokohama, Japan / Virtual(2022.7.31-8.5) No.661 (Oral)
 Meng Yin, Ken Suzuki and Hideo Miura

13. First-principles prediction of short-range ordered structures of solute atoms during aging in Al-Mg-Si alloys 1094
the 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on
Computational Mechanics (WCCM-APCOM 2022)
Yokohama, Japan / Virtual(2022.7.31-8.5) No.937 (Oral)
Yasutaka Nomura and Hajime Kimizuka

14. Electronic structure of layered organic-inorganic hybrid material $\text{WO}_3(4,4'\text{-bipyridyl})_{0.5}$ based on the first-principles calculation 1095
29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29)
Sapporo, Japan(2022.8.18-24) No.P20-SF2B-34 (Poster)
Takuya Sekikawa, Jeffery Tallon and Yoshiaki Ōno

15. Pressure dependence of the superconducting transition temperature in 2M- WS_2 and 3R- WS_2 based on the first-principles calculations 1096
The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15)
Seoul, Korea(2022.8.21-26) No.P1-cm.03 (Poster)
Wang Yu, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ōno and Kazuhiro Sano

16. Doping dependence of the superconducting transition temperature in electron-doped SrTiO_3 based on the first-principles calculations 1097
The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15)
Seoul, Korea(2022.8.21-26) No.P1-cm.19 (Poster)
Riku Ikaida, Kazuhiro Sano, Yoshimi Masuda, Takuya Sekikawa and Yoshiaki Ōno

17. Narrow Band across the Fermi level in modified-DNA based on the first-principles calculation 1098
The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15)
Seoul, Korea(2022.8.21-26) No.P2-bp.01 (Poster)
Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Beomju Hwang and Yoshiaki Ōno

18. Phonon and Point Defect Related Properties of GaN Studied using Neural Network Potential 1099
Psi-k Conference
Lausanne, Switzerland(2022.8.22-25) No.B5.43 (Oral)
K. Shimizu, E. Minamitani and S. Watanabe

19. Hydrogen trapping energy at the incoherent interface in aluminum alloys: first-principles calculations····· 1100
18th International conference on Aluminum Alloys (ICAA18)
Toyama, Japan(2022.9.4-8) No.O11-5-2 (Invited)
Masatake Yamaguchi, Tomohito Tsuru, Ken-ichi Ebihara and Mitsuhiro Itakura
20. Room-Temperature Superionic Conduction in Complex Transition Metal Hydrides with High Hydrogen Coordination ······ 1101
The 59th European High Pressure Research Group Meeting on High Pressure Science and Technology (EHPRG2022)
Uppsala, Sweden(2022.9.5-8) (Invited)
Shigeyuki Takagi
21. “Design and Synthesis” of organic semiconductor crystals: towards the rational design of crystal structures for efficient carrier transport ······ 1102
UHMOB International Conference Organic Semiconductors
Mainz, Germany(2022.9.6-9) (Invited)
Kazuo Takimiya
22. Magnetization singularity in the composition of substitutional Ir atoms in LSMO epitaxial films ······ 1103
The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22)
Sapporo, Japan(2022.9.11-16) No.Tue-G1-2 (Oral)
Kenichi Kaminaga, Hiroshi Naganuma, Kanta Suzuki, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto
23. Phonon and Point Defect Related Properties of GaN Studied using Neural Network Potential ··· 1104
The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22)
Sapporo, Japan(2022.9.11-16) No.Mon-I2-7 (Oral)
Koji Shimizu, Emi Minamitani and Satoshi Watanabe
24. MIGRATION OF ALLOYING ELEMENTS AND FORMATION OF INTERMETALLIC PHASES BETWEEN CHROMIUM-BASED AND ZIRCONIUM-BASED ALLOYS ······ 1105
The 18th Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys TOFA2022
Krakow, Poland(vedio presentation)(2022.9.12-16) No.O22 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

25. Molecular Dynamics Study of Interfacial Affinity between Surface-Modified Inorganic Solid and Polymer 1106
 13th Asian Thermophysical Properties Conference, ATPC2022
 Sendai, Japan(Online)(2022.9.26-30) No.OS2-1-02 (Oral)
 Takamasa Saito, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa and Donatas Surblys
26. Terahertz frequency shifts due to multiphonon scattering 1107
 11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources (WIRMS2022)
 Hiroshima, Japan(Hybrid Format)(2022.10.6-9) No.S3-2 (Invited)
 Masae Takahashi
27. Vacancy Ordering in Zirconium Carbide 1108
 MS&T22 Technical Meeting and Exhibition
 Pittsburgh, USA(2022.10.9-12) (Invited)
 Theresa Davey and Ying Chen
28. Efficient Phase Diagram Determination via Sequential Learning 1109
 MS&T22 Technical Meeting and Exhibition
 Pittsburgh, USA(2022.10.9-12) (Oral)
 Theresa Davey, Brandon Bocklund, Zi-Kui Liu and Ying Chen
29. Microscopic Electrochemical Properties of Carbon Steels and Metallurgical Approach for High Corrosion Resistance 1110
 242nd Electrochemical Society (ECS) Meeting
 Atlanta, USA(2022.10.9-13) No.C04-0799 (Oral)
 M. Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Yu Sugawara and Nobuyoshi Hara
30. Possible Metallization of Mn-DNA Based on the First-principles Calculation 1111
 2nd International Conference on Carbon Chemistry and Materials (CCM-2022)
 Rome, Italy(2022.10.10-14) (Invited)
 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai and Yoshiaki Ōno

31. Intermetallic phase formation and alloying element migration in a Cr-alloy coated Zr-alloy cladding system 1112
 NuMat 2022: The Nuclear Materials Conference
 Ghent, Belgium(2022.10.24-28) No.O1.3 (Oral)
 Theresa Davey and Ying Chen
32. Prédiction de la chaleur de formation d'intermétalliques par calcul DFT massif et apprentissage automatique supervisé 1113
 Matériaux 2022 – Colloque # 13.
 Lille, France(2022.10.24-28) No.8468 (Oral)
 Jean-Claude Crivello, Runan Xie, Céline Barreteau, Nataliya Sokolovska and
 Jean-Marc Joubert
33. Atomistic Insights of Complex Hydrides for All-Solid-State-Battery Application using Molecular Dynamics Simulation 1114
 17th International Symposium on Metal-Hydrogen Systems(MH2022)
 Perth, Australia(2022.10.30-11.3) (Oral)
 Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Shigeyuki Takagi and Shin-ichi Orimo
34. Combining First-Principles Calculations with Experimental Data in Phase Diagram Modelling for Designing Advanced Materials 1115
 International Conference on Advanced Materials, Metallurgy and Manufacturing (ICAMMM 2022)
 Chandigarh, India(2022.11.1-3) (Invited)
 Theresa Davey
35. Stability of intermetallic phases in Cr-alloy coated Zr-alloy cladding of nuclear fuel element: A first-principles study 1116
 The 23th Pacific Basin Nuclear Conference 2022 (PBNC 2022)
 Chongqing, China(Online)(2022.11.1-4) No.1517 (Invited)
 Ying Chen and Theresa Davey

36. A theoretical study on Dynamical Processes of Charge Transfer Excitons at the Interface of Organic Thin-Film Solar Cells 1117
 33rd International Photovoltaic Science and Engineering Conference
 Nagoya, Japan(2022.11.13-17) No.MoO-32b-04 (Oral)
 Sumire Ikeyama, Megumi Mineshita, Yuzuka Minami and Azusa Muraoka
37. Accelerating Materials Discovery using Universal Neural Network Potential and *Ab-initio* Calculations 1118
 The 6th International Symposium on Frontiers in Materials Science(FMS2022)
 Phu Quoc Island, Vietnam(2022.11.21-23) No.TC-I06 (Invited)
 Tien Quang Nguyen, Yusuke Nanba, Michihisa Koyama, Mary Clare Escaño and Masahiko Tani
38. DFT study of hydrogen-evolution reaction on Mo-based alloys 1119
 2022 MRS Fall Meeting & Exhibit
 Boston, USA(2022.11.27-12.2) No.EN07.09.04 (Oral)
 Rodion V. Belosludov, Ruirui Song, Jiuhui Han and Hidemi Kato
39. CP-AFM study on electrical properties of grain boundaries in copper 1120
 The 17th International Student Conference on Advanced Science and Technology (ICAST) 2022
 Kumamoto, Japan(2022.12.1-2) No.7-12 (Oral)
 Renya Sakaki and Sadahiro Tsurekawa
40. Large-scale calculation of dynamical spin structure factor for correlated electron systems 1122
 The 13th TOYOTA RIKEN International Workshop: Integrated Spectroscopy for Strong Electron Correlation -Theory, Computation and Experiment(ISSEC2022)
 University of Tokyo, Japan(2022.12.5-8) No.P16 (Poster)
 Hidemaro Suwa, Gia-Wei Chern, Kipton Barros and Cristian D. Batista
41. Molecular Dynamics simulation study of contact mechanics of Titanium sphere indented on Hydroxyapatite plane taking into account effect of interfacial chemical reaction 1123
 The 6th International Conference on Material and Reliability (ICMR2022)
 Yamaguchi, Japan(2022.12.7-9) No.OS4-5 (Oral)
 Pham Dinh Dat, Yuichi Otsuka and Yukio Miyashita

42. Effect of Carbon Support Structures on Electrode Reaction Activity of Catalyst Layer in Polymer Electrolyte Fuel Cell: Large-scale Reactive Molecular Dynamics Simulations 1125
AVS Pacific Rim Symposium on Surfaces, Coatings and Interfaces (PacSurf 2022)
USA(2022.12.11-15) No.EH-WeM2-8 (Oral)
Tetsuya Nakamura, Riku Otuski, Yuta Asano, Qian Chen, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
43. Large Scale Molecular Dynamics Simulation Study on Ionomer Coating of Pt Nanoparticles of Polymer Electrolyte Fuel Cells. 1126
AVS Pacific Rim Symposium on Surfaces, Coatings and Interfaces (PacSurf 2022)
USA(2022.12.11-15) No.EH-WeM2-9 (Oral)
Riku Otuski, Tetsuya Nakamura, Yuta Asano, Qian Chen, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

<2023 年>

1. Extraction behavior of the lightest Actinide, Actinium, for targeted alpha therapy 1127
International Symposium on Zero-Carbon Energy Systems (IZES)
Tokyo, Japan(2023.1.10-12) No.A23-1 (Oral)
Masahiko Nakase, Kenji Shirasaki, Miki Harigai, Shingo Sugawara, Shinta Watanabe,
Chihiro Tabata and Tomoo Yamamura
2. Reactive molecular dynamics simulations clarifying the effect of carbon nanotube (CNT) orientations on
mechanical properties of SiC/CNT composites 1128
47th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2023)
Daytona Beach, FL, USA(2023.1.22-27) No.(ICACC-GYIF-002-2023) (Invited)
Yixin Su, Yuta Asano, Qian Chen, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
3. Local bonding and carbon vacancy ordering in UHTC high-entropy carbides 1129
47th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2023)
Daytona Beach, FL, USA(2023.1.22-27) No.ICACC-S18-033-2023 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
4. Thermodynamic Analysis of Ordering Behavior in High-entropy Alloys 1130
新学術領域研究「ハイエントロピー合金」国際ワークショップ
Kyoto, Japan(2023.2.14-15) (Poster)
Masanori Enoki and Hiroshi Ohtani
5. Solid Solution and Partially Disordered FeNiCoCrMnAl_x and FeNiCoCrPdAl_x High Entropy Alloys:
An Insight from First-Principles 1131
International Workshop on High-entropy Alloys
Kyoto, Japan(2023.2.14-15) No.P24 (Poster)
Nguyen-Dung Tran and Ying Chen
6. DFT-Proposed Mechanism of Friedel-Crafts Acylation of Indole Using Metal Triflate Catalysts 1132
Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10)
Quy Nhon, Vietnam(2023.2.19-23) No.P47 (Poster)
Kieu Van Thuy Nguyen, Ha My Tran and Nguyen Nguyen Pham Tran

7. A QSPR model for the relationship between the structure and the corrosion resistance of nitrogen-containing heterocyclic compounds 1133
The 10th Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10)
Quy Nhon, Vietnam(2023.2.19-23) No.P129 (Poster)
Nguyen Tran Duy Nguyen, Tran Ha My and Pham Tran Nguyen Nguyen

8. MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF INTERACTION BETWEEN G3-PAMAM AND HIV DRUGS 1134
The 10th Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10)
Quy Nhon, Vietnam(2023.2.19-23) No.P154 (Poster)
Dinh Loc Tran, Thanh Loan Thi Nguyen and Nguyen Nguyen Pham Tran

9. Electronic Structure Analysis of a Novel Magnetic Tunnel Junction Device Fe/LiF/MgO Interface Based on the First-principles Calculations..... 1135
7th edition of Global Energy Meet (GEM-2023)
Boston, USA(2023.3.6-10) (Invited)
Takuya Sekikawa, Kazuki Takada and Yoshiaki Ōno

10. Stability of transition metal high entropy alloys: from First-principles and machine learning..... 1136
TMS 2023, 152nd Annual Meeting & Exhibition
San Diego, CA, USA(2023.3.19-24) (Invited)
Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Chang Liu, Xinming Wang and Jun Ni

11. First-principles investigation of alloying element migration and intermetallic phase formation in a Cr-alloy coated Zr-alloy accident tolerant nuclear fuel system 1137
TMS 2023, 152nd Annual Meeting & Exhibition
San Diego, CA, USA(2023.3.19-24) (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

12. DFT Investigation of FeNiCoCrMnAl and FeNiCoCrPdAl High Entropy Alloys: Fully Disordered versus Partially Disordered 1138
TMS 2023, 152nd Annual Meeting & Exhibition
San Diego, CA, USA(2023.3.19-24) No.J-25 (Poster)
Nguyen-Dung Tran and Ying Chen

13. Survey research of trends of the number of new doctors in materials science: spread of new research methods such as computational materials science and materials informatics in materials science..... 1139
APS March Meeting 2023
Virtual(2023.3.20-22) No.AAA01.00010 (Oral)
Yayoi Terada
14. Order-disorder Coexistence Phases in Equiatomic 3d-transition-metal Quaternary Alloys 1140
7th International Conference on Nanoscience and Nanotechnology – ICONN 2023
SRMIST, Kattakulathur, Chennai, India(Virtual Conference)(2023.3.27-29) No.IL25 (Invited)
Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Kenta Hongo
15. Comparative study of surface interactions in 2D Boron (Borophene) and Carbon (Graphene) - A DFT investigation..... 1141
7th International Conference on Nanoscience and Nanotechnology – ICONN 2023
SRMIST, Kattakulathur, Chennai, India(Virtual Conference)(2023.3.27-29) No.CP-74 (Poster)
K. Iyakutti, V.J. Surya, Rence P. Reji and Y. Kawazoe

IV 予稿集

<2021 年>

1. 垂直磁気異方性をもつ LSAT 基板上の Ir ドープ LSMO エピタキシャル薄膜…………… 1142
第 82 回応用物理学会秋季学術講演会
Online(2021.9.10-13) No.13p-S203-12 (Oral)
神永健一、鈴木貫太、丸山伸伍、松本祐司

<2022年>

1. 25%Ir 置換 LSMO エピタキシャル薄膜の特異な電気・磁気特性…………… 1143
第 69 回応用物理学会春季学術講演会
青山学院大学相模原キャンパス(+Online)(2022.3.22-26) No.23a-E204-3 (Oral)
神永健一、鈴木貫太、丸山伸伍、松本祐司

2. 人工知能(AI)技術を取り入れた核燃料開発研究の加速…………… 1144
原子力システム研究懇話会・第 315 回定例懇談会
(2022.5.1) (Oral)
小無健司

3. 振動差スペクトル計算の劇的な収束加速…………… 1149
第 24 回理論化学討論会
金沢商工会議所(2022.5.17-20) No.1L08 (Oral)
平野智倫、矢澤尚也、王琳、森田明弘

4. FMO-DPD 法による生体関係分子のシミュレーション…………… 1150
第 24 回理論化学討論会
金沢商工会議所(2022.5.17-20) No.1P01 (Poster)
奥脇弘次、土居英男、太刀野雄介、秋澤和輝、望月祐志

5. 水表面におけるフェノール光化学の超高速反応機構の解明…………… 1151
第 24 回理論化学討論会
金沢商工会議所(2022.5.17-20) No.2P02 (Poster)
石山達也、田原太平、森田明弘

6. 溶液界面の構造解明を目的とした新規グランドカノニカル分子動力学法の開発 …… 1152
第 24 回理論化学討論会
金沢商工会議所(2022.5.17-20) No.2P31 (Poster)
今泉伊織、平野智倫、森田明弘

7. 表面修飾無機固体/ポリマー界面における分子構造と親和性の評価…………… 1153
第 59 回日本伝熱シンポジウム
岐阜長良川国際会議場(2022.5.18-20) No.BPA1411 (Poster)
斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、Surblys Donatas

8. β , α -Ga₂O₃ substitutional doping: preferential configurations revisited via first-principles calculations..... 1154
 ナノ学会第 20 回大会
 Online(2022.5.20-22) No.O-15 (Oral)
 Jessiel Gueriba、水関博志、Melvin John F. Empizo、山ノ井航平、猿倉信彦、川添良幸、赤岩和明、高橋勲、吉川彰
9. 白金族金属クラスターによるアンモニアの脱水素反応..... 1155
 ナノ学会第 20 回大会
 Online(2022.5.20-22) No.O-33 (Oral)
 平林慎一、市橋正彦
10. クラスター複合体生成モデルの考察..... 1156
 ナノ学会第 20 回大会
 Online(2022.5.20-22) No.P1-08 (Poster)
 尾高英穂、市橋正彦
11. 表面テクスチャリングによる Al/Fe 摩擦界面の移着抑制機構の分子動力学シミュレーション 1157
 トライボロジー会議 2022 春 東京
 Online(2022.5.23-25) No.E15 (Oral)
 川浦正之、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司
12. 機械学習ポテンシャルを用いたパラジウム中水素拡散の同位体効果の量子論的解析..... 1159
 第 2 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム
 Online(2022.5.29-31) No.P12 (Poster)
 君塚肇、志賀基之
13. 固体高分子形燃料電池の触媒層における炭素担体の 3 次元ネットワーク構造がアイオノマー被覆挙動に与える影響の分子動力学シミュレーション 1160
 日本コンピュータ化学会 2022 年春季年会
 ハイブリッド(東京工業大学大岡山/Online)(2022.6.1-3) No.1O02 (Oral)
 大槻陸、中村哲也、浅野優太、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司

14. 固体高分子形燃料電池における高性能材料開発に向けた触媒層構造の大規模反応分子動力学シミュレーションによるメゾ構造解析…………… 1162
日本コンピュータ化学会 2022 年春季年会
ハイブリッド(東京工業大学大岡山/Online)(2022.6.1-3) No.1O03 (Oral)
中村哲也、大槻陸、浅野優太、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
15. ペプトイドナノシートの FMO-DPD シミュレーション…………… 1164
日本コンピュータ化学会 2022 年春季年会
ハイブリッド(東京工業大学大岡山/Online)(2022.6.1-3) No.1P02 (Poster)
太刀野雄介、秋澤和輝、奥脇弘次、望月祐志
16. スマネン系キノイドモノカチオンおわん型分子の電子状態計算…………… 1165
日本コンピュータ化学会 2022 年春季年会
ハイブリッド(東京工業大学大岡山/Online)(2022.6.1-3) No.2P07 (Poster)
馬場唯花、櫻井英博、村岡梓
17. 酸化コバルト触媒における水分解過程の反応機構に関する論理的研究…………… 1166
日本コンピュータ化学会 2022 年春季年会
ハイブリッド(東京工業大学大岡山/Online)(2022.6.1-3) No.2P12 (Poster)
藤原成美、山下晃一、村岡梓
18. ペプトイドナノシートの FMO 計算、ならびに DPD シミュレーション…………… 1167
第 32 回バイオ・高分子シンポジウム
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.7.28-29) No.P2 (Poster)
太刀野雄介、秋澤和輝、奥脇弘次、土居英男、望月祐志
19. FMO-DPD 法の現状と今後…………… 1169
第 71 回高分子討論会
北海道大学札幌キャンパス(2022.9.5-7) No.1H11 (Invited)
奥脇弘次、土居英男、小沢拓、望月祐志
20. 人工知能(AI)技術を取り入れた核燃料開発研究の加速(5)全体概要…………… 1171
日本原子力学会 2022 年秋の大会
茨城大学日立キャンパス(2022.9.7-9) No.1E07 (Oral)
小無健司、有田裕二、矢板毅、渡辺博道、森本恭一、森一樹、加藤信彦

21. 核変換ターゲット開発に向けた機械学習分子動力学計算による $\text{BeF}_2\text{-CsF}$ の物性評価…………… 1172
日本原子力学会 2022 年秋の大会
茨城大学日立キャンパス(2022.9.7-9) No.1G01 (Oral)
軒天太、宍戸博紀、橋爪秀利
22. オンサイトとオンラインのコンピュータ実習付きセミナーの有効性：計算物質科学人材育成コンソーシアムの取組を例としたケーススタディ…………… 1173
日本工学教育協会 第 70 回年次大会・工学教育研究講演会
Online(2022.9.7-9) No.2B23 (Oral)
寺田弥生
23. 難電析多価カチオン添加によるアルカリ金属負極のデンドライト成長抑制…………… 1174
2022 年電気化学秋季大会
神奈川大学みなとみらいキャンパス(2022.9.8-9) No.1F08 (Oral)
李弘毅、村山将来、市坪哲
24. 金属材料中の準安定ナノクラスター…………… 1175
日本物理学会 2022 年秋季大会シンポジウム(素核宇・物性共通 Online 開催)
Online(2022.9.10) No.10aS3-9 (Oral)
榎木勝徳、大谷博司
25. ひずみによるグラフェン上ガス分子吸着挙動制御ガス選択センサの第一原理動作解析…………… 1176
日本機械学会 2022 年度年次大会
富山大学(五福キャンパス)(2022.9.11-14) (Poster)
尹矇、喬向宇、張秦強、鈴木研、三浦英生
26. $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ の反強磁性励起子絶縁体状態…………… 1180
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.12aW521-4 (Oral)
諏訪秀麿、Daniel G. Mazzone、Yao Shen、Cristian D. Batista、Mark P. M. Dean
27. 動的平均場理論によるドーピングされたハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率 II…………… 1181
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.13aW331-5 (Oral)
猪熊祐輔、大野義章

28. 第一原理計算による遷移金属硫化物 WS_2 の超伝導転移温度の圧力依存性…………… 1182
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.15aW541-13 (Oral)
王宇、関川卓也、大野義章、佐野和博
29. 第一原理計算による Modified-DNA における電子状態…………… 1183
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.14aPSA-21 (Poster)
関川卓也、川井弘之、Beomju Hwang、大野義章
30. 第一原理計算を用いた $SrTiO_3$ の電子状態と超伝導 II …………… 1184
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.14pPSB-42 (Poster)
伊海田陸、関川卓也、大野義章、佐野和博、柘田佳美
31. 第一原理計算による鉄系超伝導体 111 系と同じ構造をもつ $LaCoX$ ($X=Si, Ge$) の電子状態と超伝導…………… 1188
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.14pPSB-44 (Poster)
川井弘之、大野義章、佐野和博
32. 第一原理計算による有機分子-金属ハイブリッド系 WO_3 -bipyridyl の電子状態のドーピング依存性…………… 1189
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.14pPSC-53 (Poster)
関川卓也、Jeffery L. Tallon、Shen V. Chong、大野義章
33. 第一原理計算による超伝導体 $La_3T_4Sn_{13}$ ($T=Co, Rh, Ir, Ru$) の電子状態…………… 1190
日本物理学会 2022 年秋季大会
東京工業大学大岡山キャンパス(2022.9.12-15) No.14pPSC-55 (Poster)
森田経介、川井弘之、大野義章
34. 流通式水熱法による有機修飾金属酸化物ナノ粒子の核発生・結晶成長機構解明 …… 1191
日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム
徳島大学常三島キャンパス(ハイブリッド開催)(2022.9.14-16) No.2J15 (Invited)
横哲、尾村悠希、二宮翔、西堀麻衣子、阿尻雅文

35. 第一原理計算による非化学量論 MC_x の表面エネルギーと劈開破壊の異方性評価………… 1192
日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム
徳島大学常三島キャンパス(ハイブリッド開催)(2022.9.14-16) No.2W19 (Oral)
星崎航太郎、金子昂弘、井田駿太郎、吉見享祐
36. データ駆動型 AI ラボの取り組みとサイバー触媒科学の展開………… 1193
化学工学会第 53 回秋季大会
信州大学長野(工学)キャンパス/Online(2022.9.14-16) No.DC301 (Invited)
古山通久
37. Molecular dynamics study on vibrational energy redistribution in H_3O^+Ar ………… 1195
令和 4 年度化学系学協会東北大会
岩手大学(2022.9.17-18) No.1P028 (Poster)
小柴拓実、小湊瑞央、伊藤悠吏、菅野学、大下慶次郎、美齊津文典
38. 様々な振動差スペクトルに適用可能な効率的計算手法………… 1196
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.2E10 (Oral)
平野智倫、矢澤尚也、玉琳、森田明弘
39. 疎水性及び親水性水和殻構造における水の振動スペクトルの理論解析………… 1198
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.2E11 (Oral)
丸岡俊政、平野智倫、矢澤尚也、森田明弘
40. 新規グラウンドカノニカル分子動力学法による電解質水溶液界面の構造解明………… 1200
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.3B13 (Oral)
今泉伊織、平野智倫、森田明弘
41. 酸化コバルト光触媒における酸素発生反応の理論的研究………… 1202
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.2P044 (Poster)
藤原成美、山下晃一、村岡梓

42. スマネン系キノイドモノカチオンおわん型分子と積層構造の電子状態…………… 1204
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.2P053 (Poster)
馬場唯花、櫻井英博、村岡梓
43. 非フラーレン型有機薄膜太陽電池における電荷移動型エキシトンの解離過程の理論研究 …… 1206
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.3P041 (Poster)
南柚香、池山すみれ、村岡梓
44. 固体酸化物/液相界面に適用可能なニューラルネットワーク・ポテンシャルの構築…………… 1208
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.4P073 (Poster)
小林太郎、池田龍志、村岡恒輝、中山哲
45. 酸化セリウム触媒によるニトリル水和反応の多次元自由エネルギー解析…………… 1210
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.4P075 (Poster)
遠藤昂晶、池田龍志、村岡恒輝、中山哲
46. 構造ゆらぎがある気液界面の熱抵抗の分子シミュレーション…………… 1212
第 16 回分子科学討論会
慶應義塾大学矢上キャンパス(2022.9.19-22) No.4P091 (Poster)
伊藤大晟、小川陽菜乃、伊藤孟、森田明弘
47. ピラニリデン構造を基盤とする新規 n 型有機ドーパントの開発…………… 1214
第 32 回基礎有機化学討論会
京都パルスプラザ(2022.9.20-22) No.2C05 (Oral)
松尾崇也、川畑公輔、瀧宮和男
48. 近年の計算物質科学の博士号取得者数の推移に関する調査研究—データ科学, 実験, 計算
の融合など新たな研究手法の波及展開…………… 1215
日本金属学会 2022 年秋期(第 171 回)講演大会
福岡工業大学(2022.9.20-23) No.291 (Oral)
寺田弥生

49. 全電子 *GW* 計算による軽元素添加 TiO_2 の電子状態計算…………… 1216
日本金属学会 2022 年秋期(第 171 回)講演大会
福岡工業大学(2022.9.20-23) No.399 (Oral)
佐原亮二、石川立、大野かおる、上田恭介、成島尚之
50. DFT Calculations of FeNiCoMn and FeNiCrMn quaternaries and Pd-sub-Mn Effects…………… 1217
日本金属学会 2022 年秋期(第 171 回)講演大会
福岡工業大学(2022.9.20-23) No.S1.48 (Oral)
Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey and Ying Chen
51. Al-Mg-Si 合金の時効初期における溶質原子クラスターの構造安定性に関する第一原理解析…………… 1218
日本金属学会 2022 年秋期(第 171 回)講演大会
福岡工業大学(2022.9.20-23) No.P225 (Poster)
野村泰隆、君塚肇
52. In-silico crystallization: メチルカルコゲノピレンの brickwork 型構造の計算による再現…………… 1219
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.20p-B104-12 (Oral)
ブルガレビッチ キリル、瀧宮和男
53. 傾斜組成 Ru 置換(La, Sr) MnO_3 エピタキシャル薄膜の磁性…………… 1220
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.21p-B204-10 (Oral)
佐藤岳、神永健一、永沼博、丸山伸伍、松本裕司
54. フラグメント分子軌道計算に基づく有効パラメータを用いる脂質膜中の微小ドメインの粗視化シミュレーションの試み…………… 1221
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.22p-A106-5 (Oral)
長田優志、太刀野雄介、土居英男、奥脇弘次、
ゴー ウェイ シェン メルヴィン、手老龍吾、望月祐志
55. ペプトイドナノシートに関する FMO、DPD 計算の試み-#3…………… 1222
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.22p-A106-6 (Oral)
太刀野雄介、土居英男、奥脇弘次、望月祐志

56. Machine Learning for the Discovery of Sn-Based Perovskite Solar Cell Materials for the Search of Originators 1223
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.23a-B103-6 (Oral)
大森鈴音、畑中ひなこ、金子正徳、山下晃一、村岡梓
57. Theoretical Study on the effect of fluorine substitution in ITIC-based Non-Fullerene Type Organic Thin Film Solar Cells 1224
第 83 回応用物理学会秋季学術講演会
東北大学川内北キャンパス(+Online)(2022.9.20-23) No.20p-P02-2 (Poster)
峰下恵、村岡梓
58. 固体高分子形燃料電池の触媒層における炭素担体の凝集構造が電極反応活性に与える影響の分子動力学法による解析 1225
第 130 回触媒討論会
富山大学五福キャンパス(2022.9.20-26) No.2H02 (Oral)
大槻陸、中村哲也、浅野優太、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
59. 固体高分子形燃料電池の触媒層における炭素担体のメゾ細孔構造と電極反応活性の関係解明に向けた大規模反応分子動力学シミュレーション 1226
第 130 回触媒討論会
富山大学五福キャンパス(2022.9.20-26) No.2H03 (Oral)
中村哲也、大槻陸、浅野優太、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
60. 元素固有記述子による合金ナノ粒子の安定性の記述 1227
第 130 回触媒討論会
富山大学五福キャンパス(2022.9.20-26) No.IH14 (Oral)
難波優輔、古山通久
61. 酸化チタン担持モリブデン触媒を用いた脱酸素脱水反応の理論的研究 1228
第 130 回触媒討論会
富山大学五福キャンパス(2022.9.20-26) No.P04 (Poster)
Online(2021.12.8-9) No.5 (Oral)
朝田大生、池田龍志、村岡恒輝、中川善直、富重圭一、中山哲

62. The Substantial effect of Terminal groups in cis-polyisoprene: A Multiscale Molecular Dynamics Simulation Study 1229
 第 70 回レオロジー討論会
 金沢市金沢歌劇座(2022.10.13-14) No.1B04 (Oral)
 Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
63. DFT simulation of twinnability in Cu-In alloy 1231
 日本銅学会第 62 回講演大会
 仙台国際センター(2022.10.15-16) No.1 (Oral)
 Eun-Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi and
 Sung Hwan Lim
64. 分子動力学シミュレーションによる表面修飾無機固体／高分子間の界面親和性の評価 1233
 第 43 回熱物性シンポジウム
 オンライン(2022.10.25-27) No.C213 (Oral)
 斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、Donatas Surblys
65. 多結晶アルミニウム/鉄の摩擦に対する表面テクスチャリングの影響:反応分子動力学シミュレーションによる解析 1236
 トライボロジー会議 2022 秋 福井
 福井(2022.11.9-11) No.F30 (Oral)
 川浦正之、陳茜、浅野優太、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
66. Probing chemical reaction dynamics through excited-state time-dependent *GW* simulations 1238
 13th ISAJ Symposium Frontiers of Materials, Life & Earth Sciences and Beyond
 Embassy of India, Tokyo, Japan(2022.11.18) (Invited)
 Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
67. Ac-228 を用いたアクチニウムの抽出特性 1239
 日本溶媒抽出学会第 41 回溶媒抽出討論会
 東京工業大学大岡山キャンパス(2022.11.24-25) No.P-19 (Poster)
 菅原真伍、白崎謙次、中瀬正彦
68. 高移動度有機半導体材料探索：構造-物性相関と結晶構造予測 1240
 第 16 回物性科学領域横断研究会
 Online(2022.11.25-26) (Oral)
 ブルガレビッチ キリル、瀧宮和男

69. 元素に由来した記述子による多元素ナノ合金の安定性予測…………… 1241
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.3O04 (Oral)
難波優輔、古山通久
70. 第一原理計算を用いた CsSnI₃ ペロブスカイト型太陽電池の欠陥と Ge アロイ化の理論的研究…………… 1243
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.1P17 (Poster)
小暮紗奈、大森鈴音、金子正徳、山下晃一、村岡梓
71. 有機薄膜太陽電池 PCPDTBT/PCBM 界面での電荷移動型励起子…………… 1244
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.1P22 (Poster)
吉田華乃香、立花れいな、峰下恵、南柚香、村岡梓
72. 密度汎関数法による塩化パラジウム錯体イオンの Cl 光解離過程…………… 1245
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.1P23 (Poster)
山田芽依、安齋愛子、黒崎譲、佐伯盛久、村岡梓
73. フラーレン型有機薄膜太陽電池のドナー材料探索に向けた機械学習…………… 1246
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.3P06 (Poster)
森下裕未、鏝水美里、金子正徳、山下晃一、村岡梓
74. RS (R=H, CH₃)ラジカルと HO₂ との反応経路解析…………… 1247
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.3P13 (Poster)
林美貴、山下晃一、村岡梓
75. スピントロスオーバー錯体におけるスピン物性の機械学習…………… 1248
日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会
信州大学長野(工学)キャンパス(2022.11.25-27) No.3P14 (Poster)
水越琴乃、上田結月、金子正徳、山下晃一、村岡梓

76. Ac-228 を用いたアクチニウムの抽出特性 1249
日本原子力学会東北支部第 46 回研究交流会
Online(2022.11.28) No.セッション 2-4 (Oral)
菅原真伍、白崎謙次、中瀬正彦
77. 表面修飾無機固体／高分子界面のナノスケール構造と親和性に関する分子動力学解析 1251
第 36 回分子シミュレーション討論会
東京工業大学(2022.12.5-7) No.106S (Oral)
斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、SURBLYS Donatas
78. Evaluation of SRO and MSAD in alloys using first-principles cluster expansion method 1252
第 32 回日本 MRS 年次大会
神奈川県横浜市(Online)(2022.12.5-7) No.B-I5-007 (Invited)
M. Enoki and H. Ohtani
79. Development of a Screening Scheme for Exploring Li-ion Battery Cathode Materials: Combination of Neural Network Potential and Wang-Landau Sampling 1253
The 32nd Annual Meeting of the Materials Research Society of Japan
Yokohama(2022.12.5-7) No.A-O6-003 (Oral)
T.Q. Nguyen, Y. Nanba and M. Koyama
80. Flux Optimization Using DFT Calculations for Low Temperature Growth of Ruby Crystal Layer 1254
第 32 回日本 MRS 年次大会
神奈川県横浜市(Online)(2022.12.5-7) No.A-O6-005 (Oral)
S. Ayuzawa, T. Yamada, H. Miyagawa and K. Teshima
81. Expression of Stability for Binary Alloy Nanoparticles by Element Specific Descriptor 1255
第 32 回日本 MRS 年次大会
神奈川県横浜市(Online)(2022.12.5-7) No.A-O6-006 (Oral)
Y. Nanba and M. Koyama
82. Mg イオン挿入に伴う MnO₂ 多形の相転移挙動と正極特性の解明 1256
第 48 回固体イオニクス討論会
トークネットホール仙台(仙台市民会館)(2022.12.6-8) No.2A-7 (Oral)
葉夏桐、畠山拓也、李弘毅、市坪哲

83. Exploring the Role of Neutral Molecules in Closo-Type Metal Hydride Electrolytes by Genetic Algorithm Optimization and First Principle Dynamics 1258
第 48 回固体イオニクス討論会
トークネットホール仙台(仙台市民会館)(2022.12.6-8) No.2C-4 (Oral)
Egon C. D. Santos and Hao Li
84. 照射脆化耐性を向上する析出相強靱化法の開発とローカルアプローチによるモデル化 1260
材料照射研究会 2022 「Irradiation 3.0 に向けて」
仙台国際センター(2022.12.7-9) No.S4 (Oral)
笠田竜太、近藤創介、余浩、松川義孝、大畑充
85. メチルチオ基を導入したアセン誘導体の合成と結晶構造 1261
第 49 回有機典型元素化学討論会
富山大学黒田講堂(2022.12.8-10) No.OB-025 (Oral)
金澤輝石、川畑公輔、瀧宮和男
86. 第一原理フェーズフィールド法による合金の微細構造予測 1262
合金状態図研究会 第 2 回研究会
仙台(+on-line)(2022.12.9) (Keynote)
大野かおる、佐原亮二、桑原理一

<2023 年>

1. Machine learning molecular dynamics simulation of single-walled carbon nanotube growth………… 1263
第 64 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
名古屋大学(2023.3.1-3) No.1P-16 (Poster)
Ikuma Kohata, Ryo Yoshikawa, Kaoru Hisama and Shigeo Maruyama
2. 有機半導体固体の「設計と合成」: 効率的キャリア輸送のための結晶構造設計への挑戦………… 1264
日本学術振興会産学連携 181 委員会
京都大学理学研究科セミナーハウス(2023.3.7-8) (Invited)
瀧宮和男
3. コロナ禍における計算材料科学分野の若手研究者支援 II -事例報告: 計算物質科学人材育成コンソーシアムによるセミナー活動………… 1271
日本金属学会 2023 年春期(第 172 回)講演大会
東京大学駒場 I キャンパス(2023.3.7-10) No.9 (Oral)
寺田弥生
4. 計算材料科学によるチタン表面酸化に及ぼす合金元素の影響評価………… 1272
日本金属学会 2023 年春期(第 172 回)講演大会
東京大学駒場 I キャンパス(2023.3.7-10) No.J10 (Oral)
佐原亮二、K. Kohli、S. Kr. Bhattacharya、P. Ghosh、上田恭介、成島尚之
5. Cu-Au 格子の局所緩和に関する理論的考察………… 1273
日本金属学会 2023 年春期(第 172 回)講演大会
東京大学駒場 I キャンパス(2023.3.7-10) No.208 (Oral)
陳迎、堀内寿晃、毛利哲夫
6. 金属酸化物超微細ナノ粒子の連続水熱合成法開発………… 1274
化学工学会第 88 年会
東京農工大学小金井キャンパス(2023.3.15-17) No.E213 (Oral)
横哲、千葉信孝、尾村悠希、成基明、筈居高明、阿尻雅文
7. 分子動力学シミュレーションによる表面修飾無機固体/高分子間の界面特性の評価………… 1275
化学工学会第 88 年会
東京農工大学小金井キャンパス(2023.3.15-17) No.J205 (Oral)
斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、Surblys Donatas

8. In-silico crystallization (2): brickwork 型構造シミュレーションの実験的確認と適用可能結晶系範囲の拡張 1276
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.16a-E402-9 (Oral)
ブルガレビッチ キリル、堀内信吾、瀧宮和男
9. Non-linear mode coupling mediated by three-magnon interaction in synthetic antiferromagnets 1277
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.16p-D419-14 (Oral)
Aakanksha Sud, Satoshi Iihama, Hidekazu Kurebayashi and Shigemi Mizukami
10. タンパク質の FMO-DPD シミュレーション向け有効パラメータの算定 1278
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.16p-PB02-9 (Oral)
太刀野雄介、土居英男、奥脇弘次、平野秀典、望月祐志
11. フラグメント分子軌道計算に基づく脂質膜中の微小ドメインの DPD シミュレーションのためのパラメータ開発 1279
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.17a-E302-2 (Oral)
土居英男、長田優志、太刀野雄介、奥脇弘次、ゴー ウェイ シェン メルヴィン、手老龍吾、望月祐志
12. FMO-DPD 法と内殻励起計算を用いた脂質二重膜親水基へのイオン配位状態の評価 1280
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.17a-E302-3 (Oral)
奥脇弘次、長坂将成、金城ゆう、手老龍吾、望月祐志
13. 第一原理計算に基づく磁気トンネル接合素子 Fe-LiF-MgO の電子状態 1282
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.15p-PA01-3 (Poster)
関川卓也、高田和樹、大野義章
14. Heyd-Scuseria-Ernzerhof 交換相関汎関数を用いた FeSe の第一原理バンド計算 1283
第 70 回応用物理学会春季学術講演会
上智大学四谷キャンパス(+Online)(2023.3.15-18) No.16a-PB03-1 (Poster)
川井弘之、大野義章

15. 「分子性固体」的観点からの有機半導体開発…………… 1284
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.23pG1-3 (Invited)
瀧宮和男
16. 第一原理計算に基づく低エネルギー放射線を照射された DNA の分子構造と電子状態…………… 1285
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.22aA2-1 (Oral)
関川卓也、松谷悠佑、甲斐健師、川井弘之、佐藤達彦、大野義章
17. 動的平均場理論による 2 バンド・ハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率…………… 1286
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.22aH3-6 (Oral)
猪熊祐輔、大野義章
18. 日本における計算物質科学分野の博士育成動向…………… 1287
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.23pN1-8 (Oral)
寺田弥生
19. 励起子絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 のキャリアドープ効果の研究Ⅲ…………… 1288
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.24aH2-10 (Oral)
土田駿、広瀬雄介、関川卓也、大野義章、撰待力生
20. 第一原理計算を用いた SrTiO_3 の電子状態と超伝導Ⅲ…………… 1289
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.24pPSH-10 (Poster)
伊海田陸、関川卓也、大野義章、佐野和博、栢田佳美
21. 第一原理計算による鉄系超伝導体 111 系と同じ構造の LaCoX ($X=\text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) の電子・フォノン状態と超伝導…………… 1290
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.24pPSH-13 (Poster)
川井弘之、佐野和博、尾崎泰助、大野義章

22. 第一原理計算に基づく HgTe の圧力下における電子・フォノン状態と超伝導 …………… 1291
日本物理学会 2023 年春季大会
Online(2023.3.22-25) No.24pPSH-45 (Poster)
森田経介、川井弘之、大野義章
23. Dynamic processes of charge-transfer excitons at the donor-acceptor interface of organic thin-film solar cells …………… 1292
日本化学会第 103 春季年会(2023)アジア国際シンポジウム
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.C1311-1pm-05 (Invited)
Azusa Muraoka
24. 構造および元素由来の記述子による二元ナノ合金の安定性予測…………… 1294
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K202-4pm-02 (Oral)
難波優輔、古山通久
25. 分子動力学計算による $H^+(H_2O)_{1,2}-Ar$ の振動エネルギー緩和過程の研究 …………… 1295
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K205-2pm-02 (Oral)
小柴拓実、小湊瑞央、伊藤悠吏、菅野学、大下慶次郎、美齊津文典
26. Self-assembled Structure of Amphiphilic Polythiophenes with Asymmetric Electronic Structures and its Photovoltaic Properties …………… 1296
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K301-3pm-06 (Oral)
Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
27. 3D-shaped N-type organic semiconductors based on naphthothiophene diimide: synthesis and applications…………… 1297
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K603-3pm-07 (Oral)
Masanori Sawamoto, Rukiya Matsidik and Kazuo Takimiya
28. 2 位にピナコールボラン基を有するジナフトチエノチオフェンの凝集誘起ドーブ現象 …………… 1298
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K604-2pm-07 (Oral)
花木亮太、臼井沙耶香、川畑公輔、瀧宮和男、中野恭兵、但馬敬介

29. テトラキス(メチルカルコゲノ)ジセレンシクロペンタフルオレンの合成と結晶構造…… 1299
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K604-2pm-08 (Oral)
佐原伽門、Kirill Bulgarevich、川畑公輔、瀧宮和男
30. 4,9-ジアルキルナフト[1,2-*b*:5,6-*b'*]ジチオフェン-2,7-ジオン骨格を基盤とした近赤外光吸収有機半導体材料の開発 …………… 1300
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K604-2pm-10 (Oral)
眞下清仁、川畑公輔、瀧宮和男
31. ジシアノメチレン基が置換したチエノチオフェンを終端基に有する非フラーレンアクセプターの合成と有機薄膜太陽電池への応用 …………… 1301
日本化学会第 103 春季年会(2023)
東京理科大学野田キャンパス(2023.3.22-25) No.K604-2pm-12 (Oral)
中村真人、澤本尚典、川畑公輔、瀧宮和男
32. 大規模反応分子動力学シミュレーションによる固体高分子形燃料電池の高出力化に向けたカソード触媒層における炭素担体のメゾ細孔構造が電極反応活性に与える影響の検討 …………… 1302
電気化学会第 90 回大会
東北工業大学(ハイブリッド開催)(2023.3.27-29) No.1K25 (Oral)
中村哲也、大槻陸、浅野優太、陳茜、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司

VI. 新聞記事

<2022 年>

1. 生体適合材料 MPC 弱い水素結合を観察
日刊工業新聞 (2022.12.7) (目次のみ掲載)

VII 雑誌

<2022 年>

1. ヤモリにもヒトにも大事な「弱い力」—ファンデルワールス力の機構を分子レベルで解明—
BanCul (バンカル) 2023 年春号 (季刊) (2023.3) pp.80-83 (目次のみ掲載)

VIII 学位取得

<博士>

1. タングステンブロンズ A_xWO_3 の電子状態と超伝導の理論ーバルク、表面、ナノワイヤ、有機ハイブリッド系
新潟大学大学院 自然科学研究科 数理物質科学専攻
関川卓也
2. Pr1-2-20 系における四極子秩序と超伝導の理論
飯塚優人
3. 第一原理計算による BCC Mo-Ti 基固溶体合金のボトムアップデザイン
東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻
金子昂弘

<修士>

1. Electronic states and superconducting transition temperature of transition metal disulfide WS_2 based on the first-principles calculations
Fundamental Science, Graduate School of Science and Technology, Niigata University
WANG YU
2. 第一原理計算によるドーピングされた $SrTiO_3$ の電子・フォノン状態と超伝導
新潟大学大学院 自然科学研究科 数理物質科学専攻
伊海田陸
3. ピレンと等電子構造を持つ含セレン多環芳香族の効率的な合成と有機半導体材料への応用
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
佐原伽門
4. 光学活性な 2-エチルヘキシル側鎖を持つポリチオフェンの結晶化挙動
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
須藤祐立

5. 複素芳香族を基盤とする電子受容性終端基の探索と有機薄膜太陽電池材料への応用
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
中村真人
6. リレン骨格へのメチルチオ基の位置選択的導入による新規有機半導体の合成研究
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
堀内信吾
7. ナフトジチオフェンジオン骨格を持つ近赤外吸収半導体の分子設計と合成
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
眞下清仁
8. 多価イオン含有デュアルカチオン電解液におけるアルカリ金属負極の電極特性
東北大学大学院 工学研究科 金属フロンティア工学専攻
清水大地
9. 二酸化マンガン多形正極を用いた室温作動型マグネシウム蓄電池に関する研究
東北大学大学院 工学研究科 金属フロンティア工学専攻
葉夏桐
10. Simulação computacional de transformações simultâneas nos vértices e nas faces dos grãos de um policristal.
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Daniel Gomes de Souza dos Santos
11. Simulação computacional de propriedades do aço inoxidável super-duplex em função de sua microestrutura com base na regra das misturas
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Diego Magalhães Baía
12. Proposta de modelo analítico como indicador de não aleatoriedade de núcleos na cinética de nucleação de crescimento
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Izabelle Luize Siqueira Pinheiro

13. Análise da não homogeneidade em nucleação e crescimento via descritores microestruturais não convencionais
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Laís Longo de Morais Teixeira
14. Estudo da Evolução Microestrutural e da Textura Cristalográfica do Aço UNS S32304 após Laminação a Frio e Posterior Recozimento
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Maisa Silva Fernandes
15. 半導体デバイス配線としての多結晶銅の粒界電気特性と力学特性
熊本大学熊本大学大学院自然科学教育部 材料・応用化学専攻 物質材料工学教育プログラム
榊廉也
16. B1 型(Ti, TM)C_x の非化学量論性を伴う物性変化に対する第一原理計算
東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻
星崎航太郎
17. Sn ペロブスカイト太陽電池材料における欠陥構造の理論的研究
日本女子大学大学院 理学研究科 数理・物性構造科学専攻
大森鈴音
18. ITIC 系非フラレン型有機薄膜太陽電池の創電過程におけるエキシトンダイナミクス
日本女子大学大学院 理学研究科 数理・物性構造科学専攻
峰下恵
19. 固体高分子形燃料電池のカソード触媒層における 炭素担体の 3次元凝集構造が 電極反応活性に与える影響に関する 大規模分子動力学シミュレーション
東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻
大槻陸
20. 反応分子動力学シミュレーションによる固体高分子形燃料電池の高出力化に向けたカソード触媒層における炭素担体のメゾ細孔構造の影響の解析
東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻
中村哲也

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…………… 1303
2. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 1304
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図…………… 1305