

2023 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

(2023 年 4 月～2024 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. 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. 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 3
東北大学工学研究科応用化学専攻 神永健一
3. Explore the Ionic Conductivity Trends on Divalent *Closo*-Type Complex Hydride Electrolytes 5
Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University
Dos Santos, E. C. and Li H.
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. 第一原理計算と機械学習に基づいた材料設計 14
東北大学金属材料研究所 清原慎、澁井千沙、宮本伊武己、ベ ソンミン、熊谷悠

6. 任意の電子励起固有状態に適用可能な TOMBO の開発・普及 17
横浜国立大学大学院工学研究科 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

7. STRUCTURAL DESIGN AND THERMODYNAMIC STABILITY EVALUATION OF
NEW FUNCTIONAL NANOMATERIALS 20
Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov

8. 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 24
東北大学金属材料研究所 梅津理恵

9. 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 29
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

10. 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 ... 34
名古屋大学工学研究科 君塚肇

11. 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 37
信州大学先鋭材料研究所 古山通久

12. Si 表面上に形成される p ブロック金属超薄膜の構造と電子状態 40
京都大学理学研究科 有賀哲也

13. 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 41
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

14. 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 46
島根大学次世代たたら協創センター 荒河一渡
島根大学自然科学研究科 藤井晴雅
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
15. 水酸アパタイトの摩耗素過程の分子動力学解析 48
長岡技術科学大学 Pham Ding Dat、Yuichi Otsuka
16. Experimental and computational studies on chemical reactions involving metal and metal-oxide clusters 51
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
17. 機械学習ポテンシャルによる原子・分子・イオンのダイナミクス解析 53
東京大学大学院工学系研究科 清水康司、渡邊聡
18. COHERENT DIFFRACTION IMAGING OF NANO MATERIALS BY A TABLE-TOP XUV SOURCE 56
Attosecond Science Research Team, RIKEN Center for Advanced Photonics
Giang Tran and Katsumi Midorikawa
19. 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 61
京都大学大学院工学研究科 Mayank Dixit、Takeshi Sato、Takashi Taniguchi
20. 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 68
新潟大学理学部 大野義章
新潟大学自然科学研究科 猪熊祐輔、川井弘之、伊海田陸、王宇、森田経介、米山拓希、増澤翔大、秋葉颯大
21. フラックス反応場がおよぼす酸窒化物結晶構造配列への影響理解 74
信州大学先鋭材料研究所 宮川博夫、山田哲也、手嶋勝弥

22. 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 78
大阪公立大学大学院工学研究科機械系専攻 桑原卓哉
23. Exploration of High Entropy Cathode Material for Lithium-Ion Battery 82
Shinshu University K. Hisama, T. Q. Nguyen, A. Toborosi, N. Zettsu and
M. Koyama
24. 単層カーボンナノチューブの構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション 86
東京大学工学系研究科機械工学専攻 小幡郁真、丸山茂夫
25. 単原子金属担持の CeO_2 ナノ粒子の構造および反応性に関する第一原理計算 89
東北大学材料科学高等研究所 横哲
名古屋大学工学系研究科 高見誠一
26. Strength estimation of two-phase interface in carbon steels from first principles
calculation 92
Yokohama National University H. Raebiger and K. Matsui
27. Design and Understanding of Promising Catalysts *via* Catalysis Theory 94
Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University
Hao Li
28. 電子格子ポラーカップリング相互作用による高波数振動数シフト 104
東北大学大学院理学研究科 高橋まさえ
29. 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 106
東北大学大学院工学研究科 丸山伸伍
30. 界面分光の解析と分子シミュレーションに基づく液液界面の構造ゆらぎと反応の微
視的解明 108
東北大学大学院理学研究科 森田明弘、上村哲平、仲海渡
31. ワニエ関数を用いた第一原理物性計算手法の開発 110
東北大学理学研究科 是常隆

32. 速い逆交換交差と高色純度な熱活性化遅延蛍光を示す架橋型トリアリールボランの開発 112
東北大学大学院工学研究科バイオ工学専攻 北本雄一
33. 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 116
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. エネルギー変換を指向した分子性機能性材料の探索 120
東北大学理学研究科化学専攻 豊田良順
35. 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 130
東北大学大学院工学研究科 宍戸博紀、軒天太
36. Spin-based reservoir computing using coupled magnon-magnon dynamics in Synthetic antiferromagnets (Spin RC) 133
WPI-AIMR, Tohoku University Aakanksha Sud and Shigemi Mizukami
37. アルカリイオンの同時挿入を利用したマグネシウムイオンの固体内拡散促進 138
東北大学金属材料研究所 李弘毅、斎悦、市坪哲
38. 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 140
東北大学金属材料研究所 青柳健大
39. 第一原理計算と中性子回折の協奏による高度構造解析 143
東北大学金属材料研究所 南部雄亮
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 145
東北大学金属材料研究所 小無健司、松尾悟
41. 高水素配位多核錯イオンを含む錯体水素化物におけるリチウムイオン伝導 149
東北大学金属材料研究所 高木成幸
東北大学材料科学高等研究所 Kartik Sau

42. 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 151
 東北大学金属材料研究所 尾澤伸樹、大谷優介、浅野優太、福島省吾、蘇怡心、許競翔、王楊、高橋昭、中村美穂、渡辺瑛奈子、星野有紀、川浦正之、横井瑞穂、中村哲也、石川立、工藤龍太郎、千葉ありさ、城島浩太、細野賢人、中島快、森海斗、東澤卓弥、渡部恵秋、久保百司
43. シンチレータ用新規材料探索及び単結晶育成装置の最適設計 154
 東北大学金属材料研究所 佐藤浩樹
44. 第一原理計算と機械学習による高信頼性構造材料設計 159
 物質・材料研究機構 佐原亮二、Arkapol Saengdeejing、Aaditya Manjanath、大塚秀幸
 韓国科学技術研究院 水関博志
 Indian Institute of Science Abhishek Kumar Singn、Swetlana Sucheta
 Brunel University London Souissi Maaouia
 Indian Institute of Science Education Research Pune Prasenjit Ghosh、Pallavi Chame
 東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
 東北大学工学研究科 檜山快
 Advanced Institute of Science and Technology Ciet Bui
45. Investigation of the phonon transport at the interface between silicon and multilayer-graphene 163
 Yunnan University Shiqian Hu
 The University of Tokyo Junichiro Shiomi
46. Minimization of heat transport in phononic crystals with machine learning 166
 California University of Los Angeles Yuxuan Liao
 The University of Tokyo Masato Ohnishi
47. 第一原理計算による α -G2O3 結晶の構造及び電気特性評価 169
 大阪大学レーザー科学研究所 山ノ井航平
48. 磁性体の高性能な記述子の研究 172
 東北大学金属材料研究所 鈴木通人

49. 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……………174
東北大学大学院医工学研究科 松木英敏

50. 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 II……………179
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
熊本大学大学院自然科学研究科 連川貞弘、久家浩
東北大学大学院工学研究科 吉見享祐、井田駿太郎、松浦紘夢、Du Junfeng

51. Understanding materials insights and exploring new materials using first-principles approaches combining machine learning ……………185
Tohoku University, Japan Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey,
Meng Yin, Xianyu Zhong, Pan Liu, Zihao Wang, Chaonan Xu, Xuguang Zheng,
Tomoki Uchiyama, Feng Guan, Kaede Kano, Koki Otonari, Zhengxiao Lin,
Kaiya Matsuzawa and Taisei Atsumi
Tohoku University, Japan / Beijing University of Science and Technology, China
Lei Wang
National Institute for Materials Science (NIMS), Japan Qinqiang Zhang and
Mariko Kadowaki
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

52. ZrO₂ セラミックスを対象とした機械学習原子間相互作用の構築……………192
大阪大学基礎工学研究科 Shihao Zhang、Shigenobu Ogata

53. 第一原理計算によるジルコニアの粒界エネルギーの評価 ……………193
横浜国立大学大学院環境情報研究院 松井和己

54. 非層状物質の原子層構造に関する第一原理計算197
東北大学金属材料研究所 小野頌太
55. Charged Defects in Halide Perovskites 199
Kyushu University Qing Wang and Satoshi Iikubo
56. 次世代太陽電池における光電変換メカニズム201
日本女子大学理学部数物情報科学科 村岡梓、大森鈴音、藤原成美、
馬場唯花、南柚香、蘭暖佳、岡村千奈美、大竹真愛
57. ハイスループット第一原理計算による省エネな新規形状記憶合金の開発206
東北大学工学研究科 許晶
58. 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208
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
59. 一ホウ化チタン-二ホウ化チタン界面の機械的強度特性シミュレーション210
東北大学金属材料研究所 陣場優貴、松戸玲菜、笠田竜太
60. 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^{3+} , Pd^{2+} 及び
 $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_5$ 構成元素のドーピングによる欠陥構造の変化の影響215
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
61. 汎用元素からなるスピネル型新規酸素吸放出材料の開発219
近畿大学理工学部 朝倉博行
62. チタン酸ストロンチウムに担持された Pd 粒子の熱劣化抑制機構221
大阪大学大学院工学研究科 Thanh Ngoc Pham、森川良忠

63. Computer Simulation on Fast Ion Conductors for All-Solid-State-Battery226
Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University
Kartik Sau
Institute for Materials Research (IMR), Tohoku University Shigeyuki Takagi
64. 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230
東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
65. 機械学習ポテンシャルを用いた $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-CsSnI}_3$ 界面の熱伝導計算235
九州工業大学 小林風之介、矢吹智英
九州大学 宮崎康次、飯久保智
66. 非調和フォノン特性データベースを用いた結晶構造の熱力学安定性の予測237
東京大学機械工学専攻 大西正人
67. Search of high thermal conductive materials under high pressure using machine
learning.....241
The University of Tokyo Meng Han and Junichiro Shiomi
68. 水素脆化に関する原子論的解析245
大阪大学基礎工学研究科 Shihao Zhang、Fanshun Meng、Shigenobu Ogata
69. 系統的第一原理計算とデータ駆動による強誘電性材料探索247
JFCC 設楽一希

II. 原著論文

<2022 年>

1. Anharmonic phonon renormalization and thermal transport in the type-I Ba₈Ga₁₆Sn₃₀ clathrate from first principles
Phys. Rev. B, 106[2] (2022) Art.No.024303
Masato Ohnishi, Terumasa Tadano, Shinji Tsuneyuki and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.024303>

<2023 年>

1. Giant valley-Zeeman coupling in the surface layer of an intercalated transition metal dichalcogenide
Nat. Mater., 22 (2023) pp.459-465
B. Edwards, O. Dowinton, A. E. Hall, P. A. E. Murgatroyd, S. Buchberger, T. Antonelli, G.-R. Siemann, A. Rajan, E. Abarca Morales, A. Zivanovic, C. Bigi, R. V. Belosludov, C. M. Polley, D. Carbone, D. A. Mayoh, G. Balakrishnan, M. S. Bahramy and P. D. C. King
<https://doi.org/10.1038/s41563-022-01459-z>
2. Unveiling the gemcitabine drug complexation with cucurbit[n]urils ($n = 6-8$): a computational analysis
Struct. Chem., 34 (2023) pp.1869-1882
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.1007/s11224-023-02133-z>
3. Synergetic optimization of thermoelectric properties in SnSe film via manipulating Se vacancies
J. Alloys Compd., 943 (2023) Art.No.169115
Y.F. Li, G.H. Tang, Y.N. Nie, Min Zhang, Xin Zhao and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.169115>

4. Thermodynamic Study on Initial Oxidation Behavior of TiAl-Nb Alloys at High Temperature
Metals, 13[3] (2023) Art.No.485
Zicheng Dong, Aihan Feng, Hao Wang, Shoujiang Qu and Hao Wang
<https://doi.org/10.3390/met13030485>
5. A New Spinel Chloride Solid Electrolyte with High Ionic Conductivity and Stability for Na-Ion Batteries
ACS Mater. Lett., 5[4] (2023) pp.1009-1017
Jiahui Liu, Shuo Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Qiang Sun
<https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.3c00119>
6. Computational Discovery of Active and Selective Metal-Nitrogen-Graphene Catalysts for Electrooxidation of Water to H₂O₂
ChemCatChem, 15[10] (2023) Art.No.e202300055
Payal Chaudhary, Iman Evazzade, Rodion Belosludov and Vitaly Alexandrov
<https://doi.org/10.1002/cctc.202300055>
7. First-Principles Density Functional Theory Calculations on the Potential of Sc₂CO₂ MXene Nanosheets as a Dual-Mode Sensor for Detection of Volatile Organic Compounds in Exhaled Human Breath
ACS Appl. Nano Mater., 6[7] (2023) pp.5345-5356
Rence Painappallil Reji, Sarath Kumar Chedharla Balaji, Yuvaraj Sivalingam, Yoshiyuki Kawazoe and Surya Velappa Jayaraman
<https://doi.org/10.1021/acsanm.2c05474>
8. Prediction of novel final phases in aged uranium-niobium alloys
J. Nucl. Mater., 579 (2023) Art.No.154394
Xiao L. Pan, Hao Wang, Lei L. Zhang, Yu F. Wang, Xiang R. Chen, Hua Y. Geng and Ying Chen
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2023.154394>

9. Importance of self-consistency in first-principles Eliashberg calculation for superconducting transition temperature
J. Phys. Chem. Solids, 178 (2023) Art.No.111348
Tianchun Wang, Takuya Nomoto, Takashi Koretsune and Ryotaro Arita
<https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2023.111348>
10. Substituent Effect on Stimuli-Responsive Donor-Acceptor Framework-Based 2-Thiohydantoins for Monitoring Nonanal Vapors
J. Phys. Chem. C, 127[13] (2023) pp.6466-6482
Pratiksha P. Gawas, Arbacheena Bora, Rence P. Reji, Buthanapalli Ramakrishna, Praveen B. Managutti, Christian R. Göb, Sharmarke Mohamed, Yoshiyuki Kawazoe, Surya Velappa Jayaraman, Yuvaraj Sivalingam and Venkatramaiah Nutalapati
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c08663>
11. Molecular Dynamics Study of Clathrate-like Ordering of Water in Supersaturated Methane Solution at Low Pressure
Molecules, 28[7] (2023) Art.No.2960
Rodion V. Belosludov, Kirill V. Gets, Ravil K. Zhdanov, Yulia Y. Bozhko, Vladimir R. Belosludov, Li-Jen Chen and Yoshiyuki Kawazoe
<https://doi.org/10.3390/molecules28072960>
12. Study of digital and analog resistive switching memories based on methylammonium lead iodide (MAPbI₃) perovskite by experiments and DFT calculations
J. Phys. D: Appl. Phys., 56[21] (2023) Art.No.215301
Tung Thanh Ngo, Uyen Tu Thi Doan, Quyen Truc Thi Vo, Truong Lam Huynh, Nam Hoang Vu, Hanh Kieu Thi Ta, Le Thi Mai Hoa, Yoshiyuki Kawazoe, Phuong Tuyet Nguyen and Ngoc Kim Pham
<https://doi.org/10.1088/1361-6463/acc46e>
13. The role of cation size in the ordered-disordered phase transition temperature and cation hopping mechanism based on LiCB₁₁H₁₂
Mater. Adv., 4[10] (2023) pp.2269-2280
Kartik Sau, Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Kazuaki Kisu, Ryuhei Sato and Shin-ichi Orimo
<https://doi.org/10.1039/D2MA00936F>

14. Reinforcing Co-O Covalency via Ce(4f)-O(2p)-Co(3d) Gradient Orbital Coupling for High-Efficiency Oxygen Evolution
Adv. Mater., 35[30] (2023) Art.No.2302462
Meng Li, Xuan Wang, Kun Liu, Huamei Sun, Dongmei Sun, Kai Huang, Yawen Tang, Wei Xing, Hao Li and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/adma.202302462>
15. Spontaneous topological Hall effect induced by non-coplanar antiferromagnetic order in intercalated van der Waals materials
Nat. Phys., 19 (2023) pp.961-968
H. Takagi, R. Takagi, S. Minami, T. Nomoto, K. Ohishi, M.-T. Suzuki, Y. Yanagi, M. Hirayama, N. D. Khanh, K. Karube, H. Saito, D. Hashizume, R. Kiyonagi, Y. Tokura, R. Arita, T. Nakajima and S. Seki
<https://doi.org/10.1038/s41567-023-02017-3>
16. Molecular Dynamics Simulations on Epoxy/Silica Interfaces Using Stable Atomic Models of Silica Surfaces
Langmuir, 39[20] (2023) pp.7063-7078
Katsumi Hagita, Tomohiro Miyata and Hiroshi Jinnai
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c00306>
17. Asymmetry in core structure and mobility of basal dislocations in a Ti₃SiC₂ MAX phase: An atomistic study with machine-learned force fields
Phys. Rev. Materials, 7 (2023) Art.No.053608
Rana Hossain, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.7.053608>
18. An accurate interatomic potential for the TiAlNb ternary alloy developed by deep neural network learning method
J. Chem. Phys., 158[20] (2023) Art.No.204702
Jiajun Lu, Jinkai Wang, Kaiwei Wan, Ying Chen, Hao Wang and Xinghua Shi
<https://doi.org/10.1063/5.0147720>

19. Structural Changes of Aggregated Filler Particles in Elongated Rubbers through Two-Dimensional Pattern Reverse Monte Carlo Modeling
Macromolecules, 56[12] (2023) pp.4457-4467
Katsumi Hagita, Tetsuo Tominaga, Ryota Yamamoto and Takuo Sone
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c00091>
20. Synthetic first-principles studies from phase equilibria to microstructural formation in the Fe-Pt L₁₀ phase
Phys. Rev. B, 107[17] (2023) Art.No.174111
M. Ohno, Y. Chen, Y. Chinda and T. Mohri
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.174111>
21. Insight into the direct conversion of methane to methanol on modified ZIF-204 from the perspective of DFT-based calculations
RSC Adv., 13[23] (2023) pp.15926-15933
Thong Nguyen-Minh Le, Thu Bao Nguyen Le, Phat Tan Nguyen, Trang Thuy Nguyen, Quang Ngoc Tran, Toan The Nguyen, Yoshiyuki Kawazoe, Thang Bach Phan and Duc Manh Nguyen
<https://doi.org/10.1039/D3RA02650G>
22. Formation energy crossings in Ga₂O₃-Al₂O₃ quasibinary system: ordered structures and phase transitions in (Al_xGa_{1-x})₂O₃
Jpn. J. Appl. Phys., 62[6] (2023) Art.No.065502
Jessiel Siaron Gueriba, Hiroshi Mizuseki, Melvin John F. Empizo, Kohei Yamanoi, Nobuhiko Sarukura, Eiichi Tamiya, Yoshiyuki Kawazoe, Kazuaki Akaiwa, Isao Takahashi and Akira Yoshikawa
<https://doi.org/10.35848/1347-4065/acd42c>
23. Tuning the Coordination Environment of Single-Atom Iron Catalysts Towards Effective Nitrogen Reduction
ChemCatChem, 15[14] (2023) Art.No.e202300669
Zhongyuan Guo, Chuangwei Liu, Chenghua Sun, Jiang Xu, Hao Li and Tianyi Wang
<https://doi.org/10.1002/cctc.202300669>

24. Interplay of hydrogen and point defects in B2-type PdCu: A density functional theory study
Int. J. Hydrogen Energy, 48[92] (2023) pp.35997-36009
Akihiro Mitsuhara, Hiroshi Yukawa and Hajime Kimizuka
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.06.001>
25. Spin-Derived Electric Polarization and Chirality Density Inherent in Localized Electron Orbitals
Phys. Rev. Lett., 130[25] (2023) Art.No.256801
Shintaro Hoshino, Michi-To Suzuki and Hiroaki Ikeda
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.256801>
26. Analysis of Al site-directing ability of organic structure-directing agents in FER and CHA zeolites: a computational exploration of energetic preferences
Chem. Commun., 59[58] (2023) pp.8953-8956
Kota Oishi, Koki Muraoka and Akira Nakayama
<https://doi.org/10.1039/D3CC01779F>
27. Ce-Induced Differentiated Regulation of Co Sites via Gradient Orbital Coupling for Bifunctional Water-Splitting Reactions
Adv. Energy Mater., 13[30] (2023) Art.No.2301162
Meng Li, Xuan Wang, Kun Liu, Zhuoya Zhu, Hanyu Guo, Meize Li, Han Du, Dongmei Sun, Hao Li, Kai Huang, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/aenm.202301162>
28. NO Oxidation Using H₂O₂ at a Single-Atom Iron Catalyst
J. Phys. Chem. C, 127[27] (2023) pp.13011-13020
Weijie Yang, Liugang Chen, Binghui Zhou, Zhenhe Jia, Xiaoshuo Liu, Yanfeng Liu, Hao Li and Zhengyang Gao
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c01976>

29. Constructing a rhenium complex supported on g-C₃N₄ for efficient visible-light-driven photoreduction of CO₂ to CO *via* a novel Z-scheme heterojunction
J. Mater. Chem. A, 11[32] (2023) pp.17145-17158
Phuong Ngoc Nguyen, Trang Thanh Tran, Quynh Anh Thi Nguyen,
Yoshiyuki Kawazoe, S. V. Prabhakar Vattikuti, Long V. Le, Viet Quoc Bui,
Tuan Manh Nguyen and Nam Nguyen Dang
<https://doi.org/10.1039/D3TA01502E>
30. Electron-capture decay rate of ⁷Be encapsulated in a C₇₀ fullerene cage
Phys. Rev. C, 108[1] (2023) Art.No.L011301
Tsutomu Ohtsuki, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.108.L011301>
31. High-performance descriptor for magnetic materials: Accurate discrimination of magnetic structure
Phys. Rev. B, 108[1] (2023) Art.No.014403
Michi-To Suzuki, Takuya Nomoto, Eiaki V. Morooka, Yuki Yanagi and
Hiroaki Kusunose
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.014403>
32. Methylthiolation of Acenes: Change of Crystal Structure from Herringbone to Rubrene-like Pitched π -Stacking Structure
Cryst. Growth Des., 23[8] (2023) pp.5941-5949
Kiseki Kanazawa, Kirill Bulgarevich, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.3c00525>
33. Why Is C-C Coupling in CO₂ Reduction Still Difficult on Dual-Atom Electrocatalysts?
ACS Catal., 13[14] (2023) pp.9695-9705
Weijie Yang, Zhenhe Jia, Binghui Zhou, Liugang Chen, Xunlei Ding, Long Jiao,
Huiling Zheng, Zhengyang Gao, Qiang Wang and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c01768>
34. Phase equilibria of the Co-Cr-Mn ternary system at 700 °C
J. Alloys Compd., 965 (2023) Art.No.171315
K. Han, R. Sahara, T. Abe, K. Oikawa, N. Ueshima and I. Ohnuma
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.171315>

35. Electronic and optical properties of C_{60}/Ti_2CT_2 and $C_{60}/Ti_3C_2T_2$ ($T = F, OH, \text{ or } O$) Heterostructures
Comput. Mater. Sci., 228 (2023) Art.No.112364
Zahra Hajiahmadi, Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Alireza Mostafaei, Sergii Chertopalov, Thomas D. Kühne, Gianaurelio Cuniberti, Hamid Hosano, Hannes Raebiger and Kaoru Ohno
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112364>
36. Crystal-Structure Simulation of Methylthiolated *Peri*-Condensed Polycyclic Aromatic Hydrocarbons for Identifying Promising Molecular Semiconductors: Discovery of 1,3,8,10-tetrakis(methylthio)peropyrene Showing Ultrahigh Mobility
Adv. Mater., 35[49] (2023) Art.No.2305548
Kirill Bulgarevich, Shingo Horiuchi and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1002/adma.202305548>
37. Implementation of Wang-Landau Algorithm for Probing Thermodynamic Stable Configuration of Multi-Element Materials and Application to Multinary Alloy Nanoparticles
J. Comput. Chem. Jpn., 9 (2023) Art.No.2022-0013
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
<https://doi.org/10.2477/jccjie.2022-0013>
38. Superlattice MAX Phases with A-Layers Reconstructed into 0D-Clusters, 1D-Chains, and 2D-Lattices
J. Phys. Chem. C, 127[30] (2023) pp.14906-14913
Mohammad Khazaei, Soungmin Bae, Rasoul Khaledialidusti, Ahmad Ranjbar, Hannu-Pekka Komsa, Somayeh Khazaei, Mohammad Bagheri, Vei Wang, Yasuhide Mochizuki, Mitsunaki Kawamura, Gianaurelio Cuniberti, S. Mehdi Vaez Allaei, Kaoru Ohno, Hideo Hosono and Hannes Raebiger
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c02233>
39. Contrasted behaviours of methylthiolated perylene and pyrene as organic semiconductors: implications of molecular electronic structure and crystal structure
J. Mater. Chem. C, 11[32] (2023) pp.10809-10815
Kazuo Takimiya, Kirill Bulgarevich and Singo Horiuchi
<https://doi.org/10.1039/D3TC02063K>

40. Modulating the electronic structures of cobalt-organic frameworks for efficient electrocatalytic oxygen evolution
J. Colloid Interface Sci., 650[Part B] (2023) pp.1949-1957
Yongchao Hao, Zhongyuan Guo, Huiya Cheng, Chenghao Yao, Shuling Cheng, Lizhi Yi and Hao Li
<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2023.07.151>
41. Origin of the superior oxygen reduction activity of zirconium nitride in alkaline media
Chem. Sci., 14[34] (2023) pp.9000-9009
Heng Liu, Di Zhang, Stuart M. Holmes, Carmine D'Agostino and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D3SC01827J>
42. Explore the Ionic Conductivity Trends on B₁₂H₁₂ Divalent *Closo*-Type Complex Hydride Electrolytes
Chem. Mater., 35[15] (2023) pp.5996-6004
Egon Campos dos Santos, Ryuhei Sato, Kazuaki Kisu, Kartik Sau, Xue Jia, Fangling Yang, Shin-ichi Orimo and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c00975>
43. Effect of interlayer K ordering on water intercalation behavior in δ -type layered manganese dioxide
Energy Storage Mater., 61 (2023) Art.No.102912
Norihiko L. Okamoto, Hiroki Yoshisako and Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1016/j.ensm.2023.102912>
44. Influence of vibronic interaction of charge transfer excitons in PTB7/BTA-based nonfullerene organic solar cells
J. Chem. Phys., 159[4] (2023) Art.No.044307
Sumire Ikeyama and Azusa Muraoka
<https://doi.org/10.1063/5.0150140>
45. Extremely Large Response of Phonon Coherence in Twisted Penta-NiN₂ Bilayer
Small, 19[48] (2023) Art.No.2303295
Chenxin Zhang, Jie Sun, Yiheng Shen, Cunzhi Zhang, Qian Wang, Akira Yoshikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
<https://doi.org/10.1002/sml.202303295>

46. Effects of intermetal distance on the electrochemistry-induced surface coverage of M-N-C dual-atom catalysts
Chem. Commun., 59[72] (2023) pp.10761-10764
Weijie Yang, Zhenhe Jia, Liugang Chen, Binghui Zhou, Di Zhang, Yulan Han, Zhengyang Gao and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D3CC03208F>
47. The autocatalytic evolution of martensitic microstructure
Mater. Sci. Technol., 39[12] (2023) pp.1483-1489
J. R. C. Guimarães, P. R. Rios and A. L. M. Alves
<https://doi.org/10.1080/02670836.2023.2173432>
48. Role of Terminal Groups of *cis*-1,4-Polyisoprene Chains in the Formation of Physical Junction Points in Natural Rubber
Biomacromolecules, 24[8] (2023) pp.3589-3602
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1021/acs.biomac.3c00355>
49. Dextran: A Multifunctional and Universal Electrolyte Additive for Aqueous Zn Ion Batteries
Adv. Energy Mater., 13[37] (2023) Art.No.2301743
Jing Li, Zhongyuan Guo, Jiacheng Wu, Zhi Zheng, Zixun Yu, Fangxin She, Leo Lai, Hao Li, Yuan Chen and Li Wei
<https://doi.org/10.1002/aenm.202301743>
50. Polysilyne chains bridged with beryllium lead to flat 2D Dirac materials
Sci. Rep., 13 (2023) Art.No.13182
Masae Takahashi
<https://doi.org/10.1038/s41598-023-40481-2>

51. Computational study of van der Waals interaction at the sub-nanometer scale and its influence on the molecular behavior under confinement conditions in graphene-2D h-BN heterostructure
Int. J. Quantum Chem., 123[21] (2023) Art.No.e27205
Kombiah Iyakutti, V. J. Surya, Iyakutti Lakshmi, R. Rajeswarapalanichamy and Y. Kawazoe
<https://doi.org/10.1002/qua.27205>
52. High-strength TiB-TiB₂ ceramics fabricated by low-temperature sintering with mechanically milled aids
Ceram. Int., 49[22, Part A] (2023) pp.34863-34871
Yuki Jimba, Yasuki Okuno, Sosuke Kondo, Hao Yu, Yasuyuki Ogino, Shuhei Nogami and Ryuta Kasada
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.08.160>
53. Off-stoichiometry and molybdenum substitution effects on elastic moduli of B1-type titanium carbide
Sci. Rep., 13 (2023) Art.No.13631
Shuntaro Ida, Kotaro Hoshizaki, Takahiro Kaneko, Xi Nan, Nobuaki Sekido and Kyosuke Yoshimi
<https://doi.org/10.1038/s41598-023-40969-x>
54. Site occupancies in a chemically complex σ -phase from the high-entropy Cr-Mn-Fe-Co-Ni system
Acta Mater., 259 (2023) Art.No.119277
Jean-Marc Joubert, Yordan Kalchev, Andrea Fantin, Jean-Claude Crivello, Rico Zehl, Erik Elkaim and Guillaume Laplanche
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119277>
55. Comparative Study between 2-Furonitrile and 2-Cyanopyridine as Dehydrants in Direct Synthesis of Dialkyl Carbonates from CO₂ and Alcohols over Cerium Oxide Catalyst
ChemSusChem, 16[24] (2023) Art.No.e202300768
Wen Sun, Peilang Li, Mizuho Yabushita, Yoshinao Nakagawa, Yuqi Wang, Akira Nakayama and Keiichi Tomishige
<https://doi.org/10.1002/cssc.202300768>

56. Magnetically Controllable Two-Dimensional Spin Transport in a 3D Crystal
Adv. Funct. Mater., 33[43] (2023) Art.No.2300995
Oliver Dowinton, Denis Maryenko, Rodion Vladimirovich Belosludov,
Bohm-Jung Yang and Mohammad Saeed Bahramy
<https://doi.org/10.1002/adfm.202300995>
57. Direct Observation of Vacancy-Cluster-Mediated Hydride Nucleation and the Anomalous
Precipitation Memory Effect in Zirconium
Small, 19[52] (2023) Art.No.2300319
Si-Mian Liu, Shi-Hao Zhang, Shigenobu Ogata, Hui-Long Yang, Sho Kano,
Hiroaki Abe and Wei-Zhong Han
<https://doi.org/10.1002/sml.202300319>
58. Quinoidal Acenedichalcogenophenediones for Near-Infrared-Absorbing Organic
Semiconductors: Effects of Chalcogen Atom Substitution on the Physicochemical and
Carrier Transport Properties
Chem. Mater., 35[18] (2023) pp.7628-7642
Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c01350>
59. Prediction of Born effective charges using neural network to study ion migration under
electric fields: applications to crystalline and amorphous Li_3PO_4
Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods, 3[1] (2023) Art.No.2253135
Koji Shimizu, Ryuji Otsuka, Masahiro Hara, Emi Minamitani and Satoshi Watanabe
<https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2253135>
60. Identifying hexagonal 2D planar electrocatalysts with strong OCHO^* binding for
selective CO_2 reduction
J. Mater. Chem. A, 11[38] (2023) pp.20528-20538
Yuefeng Zhang, Tianyi Wang, Fei Wang, Huiling Zheng, Zhiyuan Zeng and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D3TA04714H>

61. Unleashing the power of boron: enhancing nitrogen reduction reaction through defective ReS₂ monolayers
Phys. Chem. Chem. Phys., 25[37] (2023) pp.25389-25397
Thi H. Ho, Viet Q. Bui, Quynh Anh T. Nguyen, Yoshiyuki Kawazoe, Seong-Gon Kim and Pham Cam Nam
<https://doi.org/10.1039/D3CP02647G>
62. Enhancing phenanthrene hydrogenation *via* controllable phosphate deposition over Ni₂P/Al₂O₃ catalysts
Chem. Eng. Sci., 282 (2023) Art.No.119251
Jieying Jing, Zhongyuan Guo, Ze Li, Yu Chen, Hao Li and Wen-Ying Li
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119251>
63. Valley-dimensionality locking of superconductivity in cubic phosphides
Sci. Adv., 9[36] (2023) Art.No.eadf6758
Lingyi Ao, Junwei Huang, Feng Qin, Zeya Li, Toshiya Ideue, Keivan Akhtari, Peng Chen, Xiangyu Bi, Caiyu Qiu, Dajian Huang, Long Chen, Rodion V. Belosludov, Huiyang Gou, Wencai Ren, Tsutomu Nojima, Yoshihiro Iwasa, Mohammad Saeed Bahramy and Hongtao Yuan
<https://doi.org/10.1126/sciadv.adf6758>
64. A new 3D porous metallic carbon allotrope composed of 5–7 nanoribbons as an anode material for sodium-ion batteries
J. Power Sources, 584[15] (2023) Art.No.233594
Wei Sun, Dongyuan Ni, Changsheng Hou, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2023.233594>
65. A dynamic database of solid-state electrolyte (DDSE) picturing all-solid-state batteries
Nano Mater. Sci., In Press, Corrected Proof (2023)
Fangling Yang, Egon Campos dos Santos, Xue Jia, Ryuhei Sato, Kazuaki Kisu, Yusuke Hashimoto, Shin-ichi Orimo and Hao Li
<https://doi.org/10.1016/j.nanoms.2023.08.002>

66. Valley polarization dependence of nonreciprocal transport in a chiral semiconductor
Phys. Rev. B, 108[12] (2023) Art.No.125137
Kenta Sudo, Yuki Yanagi, Takeshi Takahashi, Kim-Khuong Huynh,
Katsumi Tanigaki, Kaya Kobayashi, Michi-To Suzuki and Motoi Kimata
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.125137>
67. Biogenic one-step synthesis of silver nanoparticles using *Quisqualis indica* linn flower
extract: Characterization, molecular docking, and DFT studies
Inorg. Chem. Commun., 158[1] (2023) Art.No.111469
Truong Tan Trung, Nguyen Thi Thanh Huong, Tran Dinh Loc, Nguyen Thanh Si,
Vo Quoc Khuong and Pham Tran Nguyen Nguyen
<https://doi.org/10.1016/j.inoche.2023.111469>
68. Tip-activated single-atom catalysis: CO oxidation on Au adatom on oxidized rutile TiO₂
surface
Sci. Adv., 9[39] (2023) Art.No.eadi4799
Yuuki Adachi, Ján Brndiar, Martin Konôpka, Robert Turanský, Qiang Zhu,
Huan Fei Wen, Yasuhiro Sugawara, Lev Kantorovich, Ivan Štich and Yan Jun Li
<https://doi.org/10.1126/sciadv.adi4799>
69. Colossal band gap response of single-layer phosphorene to strain predicted by quantum
Monte Carlo
Phys. Rev. Research, 5[3] (2023) Art.No.033223
Y. Huang, A. Faizan, M. Manzoor, J. Brndiar, L. Mitas, J. Fabian and I. Štich
<https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.033223>
70. Large anomalous Hall effect and unusual domain switching in an orthorhombic
antiferromagnetic material NbMnP
npj Quantum Mater., 8 (2023) Art.No.56
Hisashi Kotegawa, Yoshiki Kuwata, Vu Thi Ngoc Huyen, Yuki Arai, Hideki Tou,
Masaaki Matsuda, Keiki Takeda, Hitoshi Sugawara and Michi-To Suzuki
<https://doi.org/10.1038/s41535-023-00587-2>

71. All-Atom Molecular Dynamics Simulations of Poly(ethylene glycol) Networks in Water for Evaluating Negative Energetic Elasticity
Macromolecules, 56[20] (2023) pp.8095-8105
Katsumi Hagita, Sota Nagahara, Takahiro Murashima, Takamasa Sakai and Naoyuki Sakumichi
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c01121>
72. Two-dimensional pattern reverse Monte Carlo analysis of nanoparticles in polymer matrices using a combination of OpenACC and cuFFT
Comput. Phys. Commun., 295 (2023) Art.No.108971
Katsumi Hagita and Tetsuo Tominaga
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.108971>
73. Alkali Cation Additives Assisting Magnesium Cation Intercalation in Hollandite-Type Manganese Dioxide Cathodes
J. Phys. Chem. C, 127[43] (2023) pp.21271-21278
Yue Qi, Hongyi Li, Kohei Shimokawa, Xiatong Ye, Tomoya Kawaguchi and Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c03803>
74. Thermoelectric figure-of-merit of metastable crystalline ST12 germanium allotrope
Mater. Today Phys., 38 (2023) Art.No.101270
Han Meng, Masato Ohnishi, Meng An and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2023.101270>
75. Molecular dynamics simulations for interfacial structure and affinity between carboxylic acid-modified Al₂O₃ and polymer melts
J. Chem. Phys., 159[16] (2023) Art.No.164708
Takamasa Saito, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys and Momoji Kubo
<https://doi.org/10.1063/5.0169721>

76. PCTS-Controlled Synthesis of L₁₀/L₁₂ -Typed Pt-Mn Intermetallics for Electrocatalytic Oxygen Reduction
Adv. Funct. Mater., 34[6] (2024) Art.No.2310487
Wei Yan, Xuan Wang, Manman Liu, Kaiyue Ma, Liqi Wang, Qicheng Liu, Caikang Wang, Xian Jiang, Hao Li, Yawen Tang and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/adfm.202310487>
77. Crystal-structure simulation of molecular semiconductors: brickwork-related crystal structures of methylthiolated *peri*-condensed polycyclic aromatic hydrocarbons
Mater. Horiz., 10[12] (2023) pp.5492-5499
Kirill Bulgarevich and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1039/D3MH01055D>
78. Prediction of novel ordered phases in U-X (X= Zr, Sc, Ti, V, Cr, Y, Nb, Mo, Hf, Ta, W) binary alloys under high pressure
Acta Mater., 263 (2024) Art.No.119489
Xiao L. Pan, Hong X. Song, H. Wang, F.C. Wu, Y.C. Gan, Xiang R. Chen, Ying Chen and Hua Y. Geng
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119489>
79. DFT Simulation of Twinnability in Cu-In Alloy
Journal of Japan Institute of Copper, 62[1] (2023) pp.263-267
E.-A. Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi and Sung Hwan Lim
https://doi.org/10.34562/jic.62.1_263
80. Advances in materials informatics for tailoring thermal radiation: A perspective review
Next Energy, 2 (2024) Art.No.100078
Jiang Guo and Junichiro Shiomi
<https://doi.org/10.1016/j.nxener.2023.100078>
81. Importing Antibonding-Orbital Occupancy through Pd-O-Gd Bridge Promotes Electrocatalytic Oxygen Reduction
Angew. Chem. Int. Ed., 62[52] (2023) Art.No.e202314565
Shuwang Ning, Meng Li, Xuan Wang, Di Zhang, Baiyu Zhang, Caikang Wang, Dongmei Sun, Yawen Tang, Hao Li, Kang Sun and Gengtao Fu
<https://doi.org/10.1002/anie.202314565>

82. Developing auto process mapping technique for powder bed fusion using an electron beam
Progress in Additive Manufacturing (2023)
Kenta Aoyagi, Manabu Ono, Keiji Yanagihara, Kimio Wakoh and Akihiko Chiba
<https://doi.org/10.1007/s40964-023-00535-3>
83. Dimethyl carbonate synthesis from CO₂ and methanol over CeO₂: elucidating the surface intermediates and oxygen vacancy-assisted reaction mechanism
Chem. Sci., 14[47] (2023) pp.13908-13914
Dragos Stoian, Toshiyuki Sugiyama, Atul Bansode, Francisco Medina, Wouter van Beek, Jun-ya Hasegawa, Akira Nakayama and Atsushi Urakawa
<https://doi.org/10.1039/D3SC04466A>
84. The uniaxial zero thermal expansion and zero linear compressibility in distorted Prussian blue analogue RbCuCo(CN)₆
Phys. Chem. Chem. Phys., 25[48] (2023) pp.32845-32852
Lei Wang, Ya-Ning Sun, Xian-Deng Wei, Meng Yin, Ying Chen, Hideo Miura, Ken Suzuki and Cong Wang
<https://doi.org/10.1039/D3CP04563C>
85. 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>
86. Cation-Deficient Perovskites Greatly Enhance the Electrocatalytic Activity for Oxygen Reduction Reaction
Adv. Mater., 36[7] (2023) Art.No.2309266
Qun Li, Di Zhang, Jiabin Wu, Simin Dai, Heng Liu, Min Lu, Renwen Cui, Wenxi Liang, Dingsheng Wang, Pinxian Xi, Meilin Liu, Hao Li and Liang Huang
<https://doi.org/10.1002/adma.202309266>

87. Boosting Electrochemical CO₂ Reduction via Surface Hydroxylation over Cu-Based Electrocatalysts
ACS Catal., 13[24] (2023) pp.16114-16125
Congcong Li, Zhongyuan Guo, Zhongliang Liu, Tingting Zhang, Haojun Shi, Jialin Cui, Minghui Zhu, Ling Zhang, Hao Li, Huihui Li and Chunzhong Li
<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c02454>
88. Assessment of structural reliability in steam generator tubes in nuclear power plants: a study with sanicro 69 alloy
Cadernos UniFOA, 18[53] (2023) pp.1-10
Matheus Silva Oliveira, Alexandre Santos Francisco and Wesley da Silva Assis
<https://doi.org/10.47385/cadunifoa.v18.n53.4805>
89. Engineering functionalized Zr-MOFs as facile removal of indole: Experimental studies and first-principles modeling
J. Sci.: Adv. Mater. Devices, 9[1] (2024) Art.No.100661
Linh Ho Thuy Nguyen, Minh-Thong Le Nguyen, Thanh Ngoc Ha, Hieu Trung Hoang, Ngoc Kim Pham, Yoshiyuki Kawazoe, Duc Nguyen-Manh and Tan Le Hoang Doan
<https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2023.100661>
90. Identifying Stable Electrocatalysts Initialized by Data Mining: Sb₂WO₆ for Oxygen Reduction
Adv. Sci., 11[5] (2023) Art.No.2305630
Xue Jia, Zixun Yu, Fangzhou Liu, Heng Liu, Di Zhang, Egon Campos dos Santos, Hao Zheng, Yusuke Hashimoto, Yuan Chen, Li Wei and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/advs.202305630>
91. NaCl flux growth of non-polar *m*-plane ZnO epitaxial thin film on *c*-plane sapphire substrate
Thin Solid Films, 788 (2024) Art.No.140169
Kouki Kuroda, Kenichi Kaminaga, Takuto Tobe, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto
<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2023.140169>

92. Enhanced Ion Transport Through Mesopores Engineered with Additional Adsorption of Layered Double Hydroxides Array in Alkaline Flow Batteries
Small, Early View (2024) Art.No.2308791
Pengfei Wang, Kun Zhang, Hao Li, Jing Hu and Menglian Zheng
<https://doi.org/10.1002/sml.202308791>
93. Machine-Learning Based Multi-Scale Simulation for Polymer Melt Spinning Process
Nihon Reorogi Gakkaishi, 51[5] (2023) pp.281-294
Yan Xu, Souta Miyamoto and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1678/rheology.51.281>
94. A Doping-Induced $\text{SrCo}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ Nanocomposite for Efficient Oxygen Evolution in Alkaline Media
Small, Early View (2024) Art.No.2308948
Heng Liu, Yuan Wang, Pengfei Tan, Egon C. dos Santos, Stuart M. Holmes, Hao Li, Jun Pan and Carmine D'Agostino
<https://doi.org/10.1002/sml.202308948>
95. Modulation of interface modes for resonance-induced enhancement of the interfacial thermal conductance in pillar-based Si/Ge nanowires
Phys. Rev. B, 108[23] (2023) Art.No.235426
Yingzhou Liu, Yinong Liu, Jincheng Yue, Long Xiong, Lei-Lei Nian and Shiqian Hu
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.235426>
96. Metastable atomic-ordered configurations for $\text{Al}_{1/2}\text{Ga}_{1/2}\text{N}$ predicted by Monte-Carlo method based on first-principles calculations
J. Phys.: Condens. Matter, 36[13] (2024) Art.No.135001
Jessiel Siaron Gueriba, Hiroshi Mizuseki, Marilou Cadatal-Raduban, Nobuhiko Sarukura, Yoshiyuki Kawazoe, Yosuke Nagasawa, Akira Hirano and Hiroshi Amano
<https://doi.org/10.1088/1361-648X/ad1137>

97. Thermoelectric Power of a Single van der Waals Interface between Carbon Nanotubes
ACS Nano, 18[1] (2024) pp.612-617
Hiromu Hamasaki, Yifei Li, Masato Ohnishi, Junichiro Shiomi, Kazuhiro Yanagi and
Kaori Hirahara
<https://doi.org/10.1021/acsnano.3c08694>
98. Upward vibrational frequency shift due to electron-phonon polar-coupling interaction in
 $C_{12}H_{17}ClN_4OS \cdot HCl \cdot H_2O$ crystals
Chem. Phys. Impact, 8 (2024) Art.No.100442
Masae Takahashi, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and Yuka Ikemoto
<https://doi.org/10.1016/j.chphi.2023.100442>
99. Temperature and Doping Dependence of the Singlet and Triplet Pair Susceptibilities in
the Two-Band Hubbard Model Based on the Dynamical Mean-Field Theory
New Phys.: Sae Mulli, 73[12] (2023) pp.1119-1122
Yusuke Inokuma and Yoshiaki Ōno
<https://doi.org/10.3938/NPSM.73.1119>

<2024 年>

1. 計算力学による 3DP 特異界面に関連する力学現象の数値解析
まてりあ, 63[1] (2024) pp.49-53
眞山剛、君塚肇
<https://doi.org/10.2320/materia.63.49>
2. Low-temperature Ruby Crystal Growth Via a Supersaturation Process Based on Flux
Decomposition
Small, Early View (2024) Art.No.2308047
Shunsuke Ayuzawa, Tetsuya Yamada, Hiroh Miyagawa, Shuji Oishi and
Katsuya Teshima
<https://doi.org/10.1002/sml.202308047>

3. Multi-metallic Metal-Organic Framework Nanosheets with 3D Flower-like Nanostructure-Based Natural Seawater Splitting toward Stable Industrial-Scale Current Density
ACS Sustainable Chem. Eng., 12[2] (2024) pp.1038-1050
Ngoc Quang Tran, Thuong Thuong Truong, Thuy Tien Nguyen Tran, Thuy-Kieu Truong, Jianmin Yu, Tuan Dung Nguyen, Thi Anh Le, Cuong Chi Nguyen, Linh Ho Thuy Nguyen, Nam Hoang Vu, Yoshiyuki Kawazoe, Thang Bach Phan and Tan Le Hoang Doan
<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c06742>
4. Straintronics with single-layer MoS₂: A quantum Monte Carlo study
Phys. Rev. Research, 6[1] (2024) Art.No.013007
Y. Huang, M. Manzoor, J. Brndiar, M. Milivojevic and I. Štich
<https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.013007>
5. Dopant-Induced Charge Redistribution on the 3D Sponge-like Hierarchical Structure of Quaternary Metal Phosphides Nanosheet Arrays Derived from Metal-Organic Frameworks for Natural Seawater Splitting
ACS Appl. Mater. Interfaces, 16[2] (2024) pp.2270-2282
Thuy Tien Nguyen Tran, Thuy-Kieu Truong, Jianmin Yu, Lishan Peng, Xinghui Liu, Linh Ho Thuy Nguyen, Sungkyun Park, Yoshiyuki Kawazoe, Thang Bach Phan, Nhu Hoa Thi Tran, Nam Hoang Vu and Ngoc Quang Tran
<https://doi.org/10.1021/acsami.3c15117>
6. Al-Ni-Ti thermodynamic database from first-principles calculations
Calphad, 84 (2024) Art.No.102658
Arkapol Saengdeejing, Ryoji Sahara and Yoshiaki Toda
<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2023.102658>
7. A deep-neural network potential to study transformation-induced plasticity in zirconia
J. Eur. Ceram. Soc., 44[6] (2024) pp.4243-4254
Jin-Yu Zhang, Gaël Huynh, Fu-Zhi Dai, Tristan Albaret, Shi-Hao Zhang, Shigenobu Ogata and David Rodney
<https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2024.01.007>

8. Active machine learning model for the dynamic simulation and growth mechanisms of carbon on metal surface
Nat. Commun., 15 (2024) Art.No.344
Di Zhang, Peiyun Yi, Xinmin Lai, Linfa Peng and Hao Li
<https://doi.org/10.1038/s41467-023-44525-z>
9. Changes in molecular conformation and electronic structure of DNA under ^{12}C ions based on first-principles calculations
Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 548 (2024) Art.No.165231
Takuya Sekikawa, Yusuke Matsuya, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ōno, Tatsuhiko Sato and Takeshi Kai
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165231>
10. Screw dislocation core interaction with C or Nb in γ -TiAl: A multiscale study
Acta Mater., 266 (2024) Art.No.119647
Jinkai Wang, Tianlun Tan, Junchao Li, Ying Chen and Hao Wang
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119647>
11. Study on the Anharmonic Interaction in Negative Thermal Expansion Compounds Ag_2O and Cu_2O by Three-Phonon Scattering
J. Phys. Chem. C, 128[3] (2024) pp.1534-1545
Lei Wang, Ya-Ning Sun, Ying Chen and Cong Wang
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c07694>
12. Stability of Pd_xO_y Particles Supported on Strontium Titanate Perovskite under Three-Way Catalyst Operating Conditions: Implications for Sintering Resistance
ACS Catal., 14[3] (2024) pp.1443-1458
Thanh Ngoc Pham, Beatriz Andrea Choi Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c05673>

13. Unraveling the pH-Dependent Oxygen Reduction Performance on Single-Atom Catalysts: From Single- to Dual-Sabatier Optima
J. Am. Chem. Soc., 146[5] (2024) pp.3210-3219
Di Zhang, Zhuyu Wang, Fangzhou Liu, Peiyun Yi, Linfa Peng, Yuan Chen, Li Wei and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/jacs.3c11246>

14. Strain-modulated adsorption of gas molecule on graphene: First-principles calculations
Diamond Relat. Mater., 142 (2024) Art.No.110822
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Lei Wang, Hideo Miura and Ken Suzuki
<https://doi.org/10.1016/j.diamond.2024.110822>

15. A Novel N-Type Molecular Dopant With a Closed-Shell Electronic Structure Applicable to the Vacuum-Deposition Process
Adv. Mater., Early View (2024) Art.No.2311047
Takaya Matsuo, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
<https://doi.org/10.1002/adma.202311047>

16. Kinetic Modeling of Erythritol Deoxydehydration and Consecutive Hydrogenation over the ReO_x-Pd/CeO₂ Catalyst
ACS Catal., 14[3] (2024) pp.1663-1677
Ji Cao, Savitri Larasati, Mizuho Yabushita, Yoshinao Nakagawa, Johan Wärnå, Dmitry Yu. Murzin, Daiki Asada, Akira Nakayama and Keiichi Tomishige
<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c04785>

17. Precise coordination of high-loading Fe single atoms with sulfur boosts selective generation of nonradicals
PNAS, 121[4] (2024) Art.No.e2309102121
Xunheng Jiang, Binghui Zhou, Weijie Yang, Jiayi Chen, Chen Miao, Zhongyuan Guo, Hao Li, Yang Hou, Xinhua Xu, Lizhong Zhu, Daohui Lin and Jiang Xu
<https://doi.org/10.1073/pnas.2309102121>

18. Atomic sizes of Cu and Au in Cu-Au solid solution and the lattice relaxation effects on disorder-Cu₃Au phase equilibria
Comput. Mater. Sci., 235 (2024) Art.No.112772
Tetsuo Mohri, Ying Chen and Toshiaki Horiuchi
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112772>

19. Catalytic ammonia synthesis on HY-zeolite-supported angstrom-size molybdenum cluster
Chem. Sci., 15[8] (2024) pp.2914-2922
Satoshi Kamiguchi, Kiyotaka Asakura, Tamaki Shibayama, Tomoko Yokaichiya, Tatsushi Ikeda, Akira Nakayama, Ken-ichi Shimizu and Zhaomin Hou
<https://doi.org/10.1039/D3SC05447K>

20. Steering CO₂ Electroreduction to C₂+ Products via Enhancing Localized *CO Coverage and Local Pressure in Conical Cavity
Adv. Mater., Early View (2024) Art.No.2312204
Congcong Li, Tingting Zhang, Heng Liu, Zhongyuan Guo, Zhongliang Liu, Haojun Shi, Jialin Cui, Hao Li, Huihui Li and Chunzhong Li
<https://doi.org/10.1002/adma.202312204>

21. Formal description of the initial propagation of martensite and the martensitic spread
Mater. Sci. Technol., OnlineFirst (2024)
José Roberto C. Guimarães, Paulo R. Rios and André Luiz M. Alves
<https://doi.org/10.1177/02670836241228052>

22. Deciphering Structure-Activity Relationship Towards CO₂ Electroreduction over SnO₂ by A Standard Research Paradigm
Angew. Chem. Int. Ed., 63[12] (2024) Art.No.e202319913
Zhongyuan Guo, Yihong Yu, Congcong Li, Egon Campos dos Santos, Tianyi Wang, Huihui Li, Jiang Xu, Chuangwei Liu and Hao Li
<https://doi.org/10.1002/anie.202319913>

23. Multiscale simulations for polymer melt spinning process using Kremer–Grest CG model and continuous fluid mechanics model
J. Non-Newtonian Fluid Mech., 325 (2024) Art.No.105195
Yan Xu, Yuji Hamada and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105195>

24. Self-rectifying resistive switching in MAPbI₃-based memristor device
Appl. Phys. Lett., 124[5] (2024) Art.No.051601
Phu-Quan Pham, Truc-Quyen Thi Vo, Duy Khanh Le, Chuong Thanh Huynh,
Tung Thanh Ngo, Phuong Tuyet Nguyen, Anh Tuan Thanh Pham, Nam Hoang Vu,
Thang Bach Phan, Yoshiyuki Kawazoe and Ngoc Kim Pham
<https://doi.org/10.1063/5.0178032>
25. Highly efficient and transferable interatomic potentials for α -iron and α -iron/hydrogen
binary systems using deep neural networks
Comput. Mater. Sci, 235 (2024) Art.No.112843
Shihao Zhang, Fanshun Meng, Rong Fu and Shigenobu Ogata
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.112843>
26. Chain-Level Analysis of Reinforced Polyethylene through Stretch-Induced
Crystallization
ACS Macro Lett., 13[2] (2024) pp.247-251
Katsumi Hagita, Takashi Yamamoto, Hiromu Saito and Eiji Abe
<https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.3c00554>
27. Electron-capture decay rate of ⁷Be in cluster and crystal forms of beryllium: A first-
principles study
Phys. Rev. C, 109[2] (2024) Art.No.024609
Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno and Tsutomu Ohtsuki
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.109.024609>
28. Infrared laser deposition of high-quality CsBH₄ epitaxial thin films stable under
atmospheric conditions
Jpn. J. Appl. Phys., 63[2] (2024) Art.No.020905
Hibiki Murakami, Kenichi Kaminaga, Rintaro Kimura, Shingo Maruyama and
Yuji Matsumoto
<https://doi.org/10.35848/1347-4065/ad2623>

29. Origin of electrocatalytic nitrogen reduction activity over transition metal disulfides: critical role of *in situ* generation of S vacancy
J. Mater. Chem. A, 12[14] (2024) pp.8438-8446
Tianyi Wang, Zhongyuan Guo, Hirofumi Oka, Akichika Kumatani, Chuangwei Liu and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D4TA00307A>
30. Quantitative diffraction imaging using attosecond pulses
J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys., 41[6] (2024) pp.B14-B25
G. N. Tran, Katsumi Midorikawa and Eiji J. Takahashi
<https://doi.org/10.1364/JOSAB.512362>
31. Crystal-Structure Control of Molecular Semiconductors by Methylthiolation: Toward Ultrahigh Mobility
Acc. Chem. Res., 57[6] (2024) pp.884-894
Kazuo Takimiya, Kirill Bulgarevich and Kohsuke Kawabata
<https://doi.org/10.1021/acs.accounts.3c00756>
32. Bain distortion of noble metal thin films that exhibit fcc, bct, and reoriented fcc structures
Comput. Mater. Sci, 237 (2024) Art.No.112920
Shota Ono and Koharu Tamura
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.112920>
33. Singlet Even-Frequency and Triplet Odd-Frequency Superconductivity in the Two-Band Hubbard Model Based on the Dynamical Mean-Field Theory
J. Phys. Soc. Jpn., 93 (2024) Art.No.043701
Yusuke Inokuma and Yoshiaki Ōno
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.93.043701>
34. Effect of Impurities on the Formation of End-Group Clusters in Natural Rubber: Phenylalanine Dipeptide as an Impurity Protein
Macromolecules, 57[6] (2024) pp.2588-2608
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c01833>

35. Model Based on the River Meander Curve for Simulating the Adhesion of Cross-Linked Polymers to Rough Surfaces
Macromolecules, in press (2024)
Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Tomohiro Miyata and Hiroshi Jinnai
<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c02660>
36. Unraveling the mechanisms of thermal boundary conductance at the graphene-silicon interface: Insights from ballistic, diffusive, and localized phonon transport regimes
Phys. Rev. B, 109[11] (2024) Art.No.115302
Jincheng Yue, Shiqian Hu, Bin Xu, Rongkun Chen, Long Xiong, Rulei Guo, Yuanzhe Li, Lei-Lei Nian, Junichiro Shiomi and Bo Zheng
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.115302>
37. Comment on “Sum-frequency vibrational spectroscopy of centrosymmetric molecule at interfaces” [J. Chem. Phys. 158, 074701 (2023)]
J. Chem. Phys., 160[10] (2024) Art.No.107101
Tomonori Hirano, Koichi Kumagai, Tatsuya Ishiyama and Akihiro Morita
<https://doi.org/10.1063/5.0167357>
38. Crystal Structures and Superconducting Properties of Metallic Double-Chain Based Cuprate $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$
J. Phys. Soc. Jpn., 93 (2024) Art.No.044705
Masahide Hagawa, Michiaki Matsukawa, Kota Niinuma, Reiya Kudo, Yuto Mizushima, Naohisa Kawarada, Hajime Yamamoto, Kazuhiro Sano, Yoshiaki Ōno and Takahiko Sasaki
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.93.044705>
39. Securing cation vacancies to enable reversible Mg insertion/extraction in rocksalt oxides
J. Mater. Chem. A, 12[15] (2024) pp.9088-9101
Tomoya Kawaguchi, Masaya Yasuda, Natsumi Nemoto, Kohei Shimokawa, Hongyi Li, Norihiko L. Okamoto and Tetsu Ichitsubo
<https://doi.org/10.1039/D3TA07942B>

40. Benchmarking pH-field coupled microkinetic modeling against oxygen reduction in large-scale Fe-azaphthalocyanine catalysts
Chem. Sci., 15[14] (2024) pp.5123-5132
Di Zhang, Yutaro Hirai, Koki Nakamura, Koju Ito, Yasutaka Matsuo, Kosuke Ishibashi, Yusuke Hashimoto, Hiroshi Yabu and Hao Li
<https://doi.org/10.1039/D4SC00473F>
41. Effective redox reaction in a three-body smart photocatalyst through multi-interface modulation of organic semiconductor junctioned with metal and inorganic semiconductor
Applied Catalysis B: Environment and Energy, 351 (2024) Art.No.123974
Farzin Nekouei, Tianyi Wang, Farzaneh Keshtpour, Yun Liu, Hao Li and Shahram Nekouei
<https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2024.123974>
42. Water and Salt Concentration-Dependent Electrochemical Performance of Hydrogel Electrolytes in Zinc-Ion Batteries
ACS Appl. Mater. Interfaces, 16[13] (2024) pp.16175-16185
Di Zhu, Jing Li, Zhi Zheng, Songbo Ye, Yuqi Pan, Jiacheng Wu, Fangxin She, Leo Lai, Zihan Zhou, Jiaxiang Chen, Hao Li, Li Wei and Yuan Chen
<https://doi.org/10.1021/acsami.3c19112>
43. New insights into stress corrosion cracking mechanism of Alloy 600 in boiling water reactor (BWR) environment
Corros. Sci., 232 (2024) Art.No.112008
Pan Liu, Yunlong Wu, Xiangyu Zhong, Ken Oyama, Seiya Ogota, Jun Chai, Yutaka Watanabe and Tetsuo Shoji
<https://doi.org/10.1016/j.corsci.2024.112008>
44. Reversible Hydrogen Electrode (RHE) Scale Dependent Surface Pourbaix Diagram at Different pH
Langmuir, 40[14] (2024) pp.7632-7638
Heng Liu, Di Zhang, Yuan Wang and Hao Li
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.4c00298>

Ⅲ. 国際会議発表論文

< Proceeding >

< 2023 年 >

1. Control of the Adsorption Behavior of Gas Molecule on Graphene by Strain: First-Principles Calculations for Development of Multi-Gas Selective Sensors
Proceedinngs of 2023 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), (2023) pp.241-244
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Ken Suzuki, Hideo Miura and Lei Wang
<https://doi.org/10.23919/SISPAD57422.2023.10319538>

< 2024 年 >

1. Improvement of Sensitivity and Selectivity of Graphene-Based Gas Sensor by Strain
Proceedings of ASME 2023 International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Volume 4: Advanced Materials: Design, Processing, Characterization and Applications; Advances in Aerospace Technology, 4 (2024) pp. IMECE2023-112231, V004T04A006
Xiangyu Qiao, Meng Yin, Ken Suzuki and Hideo Miura
<https://doi.org/10.1115/IMECE2023-112231>

<2022 年>

1. Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
Aperiodic 2022 (10th International Conference on Aperiodic Crystals)
Hokkaido University, Sapporo, Hokkaido, Japan (2022.6.20-24) (Poster)
M.-T. Suzuki, E. V. Morooka, Y. Yanagi, T. Nomoto and H. Kusunose
2. Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
GIMRT, REIMEI, IRN Aperiodic joint international workshop
Sendai, Japan (2022.11.30-12.2) (Invited)
Michi-To Suzuki

<2023 年>

1. Computational lensless imaging using broadband attosecond pulses
International Conference on X-ray Optics and Applications (XOPT2023)
Yokohama, Japan (2023.4.18-20) No.9 (Poster)
G. N. Tran, Katsumi Midorikawa and Eiji J. Takahashi
2. Deoxydehydration Reaction by TiO₂-Supported Monomeric and Dimeric Molybdenum Oxide: A DFT Study
The 19th Korea-Japan Symposium on Catalysis (KJSC)
Seoul, Korea (2023.5.15-17) No.YP09 (Poster)
Daiki Asada
3. Cluster formations of terminal groups of polyisoprenes in natural rubbers: Molecular dynamics simulation study
The 8th Pacific Rim Conference on Rheology (PRCR2023)
Vancouver, BC, Canada (2023.5.15-19) (Oral)
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
4. Machine learning molecular dynamics simulation of single-walled carbon nanotube growth
The 23rd International Conference on the Science and Applications of Nanotubes and Low-Dimensional Materials (NT'23)
Arcachon near Bordeaux, France (2023.6.4-9) No.P185 (Poster)
Ikuma Kohata, Ryo Yoshikawa, Kaoru Hisama and Shigeo Maruyama

5. Boundary effects in SFG calculations and quadrupole contribution
2023 International Conference on “Nonlinear Optics at Interfaces”
Rome, Italy (2023.6.5-9) (Oral)
Akihiro Morita
6. Theoretical investigation of oxidation mechanism in Ti and its alloys
World Titanium Conference 2023 (Ti-2023)
Edinburgh (2023.6.12-16) (Oral)
Ryoji Sahara, Somesh Kumar Bhattacharya, Kanika Kohli, Prasenjit Ghosh,
Kyosuke Ueda and Takayuki Narushima
7. Stability of FeNiCoCrMnAlx and FeNiCoCrPdAlx: fully disordering vs. partially disordering
CALPHAD L, 50th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry
Cambridge, MA, USA (2023.6.25-30) No.O50 (Oral)
Ying Chen and Nguyen-Dung Tran
8. First-principles Thermodynamic Database for the Al-Ni-Ti
CALPHAD L, 50th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry
Cambridge, MA, USA (2023.6.25-30) No.O64 (Oral)
Arkapol Saengdeejing, Ryoji Sahara and Yoshiaki Toda
9. First-principles investigation of intermetallics and element migration in a layered Cr-Zr-X system
CALPHAD L, 50th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry
Cambridge, MA, USA (2023.6.25-30) No.P99 (Poster)
T. Davey and Y. Chen
10. Effects of Lateral Interactions on Surface Chemical Reactions Revealed by Kinetic Monte Carlo Simulations with Neural Network Potentials
17th International Congress of Quantum Chemistry
Bratislava, Slovakia (2023.6.26-7.1) No.PC65 (Poster)
Tomoko Yokaichiya

11. Be-bridged Flat Zigzag Silicene Nanoribbons and Their Extension to Nanowires
IUMRS-International Conference on Advanced Materials & 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (IUMRS-ICAM & ICMAT 2023)
Singapore (2023.6.26-30) No.A-0148 (Invited)
Masae Takahashi
12. Control of Crystal Structures of Molecular Semiconductors by Molecular Design
IUMRS-International Conference on Advanced Materials & 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (IUMRS-ICAM & ICMAT 2023)
Singapore (2023.6.26-30) No.A-1646 (Invited)
Kazuo Takimiya
13. Terahertz Frequency Shifts Due to Multiphonon Scattering
IUMRS-International Conference on Advanced Materials & 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (IUMRS-ICAM & ICMAT 2023)
Singapore (2023.6.26-30) No.A-0149 (Oral)
Masae Takahashi
14. Neural Network-based Simulation Method to Examine Ion Behaviors Under External Electric Fields: Application to Ion Migration in Amorphous Li_3PO_4
IUMRS-International Conference on Advanced Materials & 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (IUMRS-ICAM & ICMAT 2023)
Singapore (2023.6.26-30) No.A-0605 (Oral)
Koji Shimizu, Ryuji Otsuka and Satoshi Watanabe
15. Time Dependent GW Simulation of Chemical Reactions
IUMRS-International Conference on Advanced Materials & 11th International Conference on Materials for Advanced Technologies (IUMRS-ICAM & ICMAT 2023)
Singapore (2023.6.26-30) No.A-1384 (Oral)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

16. Effects of mechanically milled Ti on strengthening and sintering temperature reduction for TiB-TiB₂ composite
International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials
Processing, Fabrication, Properties, Applications (THERMEC'2023)
Vienna, Austria (2023.7.2-7) (Oral)
Yuki Jimba, Sosuke Kondo, Hao Yu, Yasuki Okuno, Shuhei Nogami and
Ryuta Kasada
17. First-principles Calculations of Piezomagnetic Coefficients in Antiferromagnets Mn₃AN
(A=Ni, Cu, Zn, Ga, Ge) and Mn₃X (X=Sn, Ge)
International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (SCES2023)
Songdo ConvensiA, Incheon, Korea (2023.7.2-7) No.19-2057 (Oral)
Michi-To Suzuki
18. Carbon vacancy ordering in multi-principal component (high entropy) UHTC carbides
XVIIIth Conference of the European Ceramic Society (ECerS2023)
Lyon, France (2023.7.2-6) (Invited)
Theresa Davey and Ying Chen
19. Effects of Lateral Interactions on Surface Chemical Reactions Revealed by Kinetic
Monte Carlo Simulations with Neural Network Potentials
the satellite meeting "Intermolecular Interactions and Properties of Gases, Liquids
and Solids" of the International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) 2023
University of Graz, Austria (2023.7.3-5) No.P24 (Poster)
Tomoko Yokaichiya
20. Theoretical study of gas storage and separation in clathrate hydrates: Role of guest-host
and guest-guest interactions
10th International Conference on Gas Hydrates (ICGH10)
Singapore (2023.7.9-14) No.431 (Oral)
Rodion V. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

21. Investigation of Heat Transport Mechanism in $\text{Cu}_2\text{-}\delta\text{Se}$ Using Molecular Dynamics method and Machine Learning Potentials
10th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena
San Diego, USA (2023.7.16-19) No.P-8 (Poster)
Tomu Hamakawa and Junichiro Shiomi
22. Observation of Coherent Phonon Dispersion Relations in a Superlattice
10th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena
San Diego, USA (2023.7.16-19) No.P-18 (Poster)
Yuxuan Liao, Hiroshi Uchiyama, Naomi Nagai, Natália Morais, Taiushun Manjo, Rulei Guo, Harsh Chandra, Ryohei Nagahiro, Bin Xu, Hiroshi Fukui, Yasuhiko Arakawa, Kaz Hirakawa and Junichiro Shiomi
23. Thermoelectric Clathrate Compound: From First-principles Calculations, Material Synthesis, to Device Application
10th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena
San Diego, USA (2023.7.16-19) No.P-24 (Poster)
Masato Ohnishi, S. Terashima, T. Yamamoto, K. Fujimura, H. Shimizu, K. Yamamoto, H. Iwase and J. Shiomi
24. Analysis of suppressed thermal transport in graphite by intercalation
10th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena
San Diego, USA (2023.7.16-19) No.P-34 (Poster)
Yijia Wu, Masato Ohnishi, Harsh Chandra, Jie Sun and Junichiro Shiomi
25. Microscopic Understanding of Interface at Liquid/Solid-Oxide and Molecular Adsorption on the Surface by Neural Network Potentials
The 26th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE26)
A-One the Royal Cruise Hotel Pattaya, Chonburi, Thailand (2023.7.20-22)
No.CHE-I6 (Invited)
Akira Nakayama

26. Relationship between the Water Distribution on Carbon Support Surface and Proton Conduction Path: Large-scale Reactive Molecular Dynamics Simulations
The 26th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE26)
A-One the Royal Cruise Hotel Pattaya, Chonburi, Thailand (2023.7.20-22)
No.CHE-O9 (Oral)
Tetsuya Nakamura, Yuta Asano, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
27. Rheology of polymer chains having end-groups associating with impurities under uniaxial elongational flows
ICR2023 (19th International Congress on Rheology)
Athens, Greece (2023.7.29-8.4) (Oral)
Shoma Fujii, Yuto Ike, Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
28. Challenges in training and retaining engineers for the mining and metallurgical sector...
7° ABM Week
São Paulo, Brazil (2023.8.1-3) (Plenary)
Celso Luiz Moraes Alves
29. First-principles study of a new superconductor LaCoSi with the same structure as 111 family of iron-based superconductors
CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics
Kobe, Japan (2023.8.4-8) No.PS1-80 (Poster)
Hiroyuki Kawai, Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno
30. First-principles study of superconducting 2M and 3R-WS₂ under pressure
CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics
Kobe, Japan (2023.8.4-8) No.PS1-82 (Poster)
Wang Yu, Takuya Sekikawa, Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno
31. Doping dependence of superconducting transition temperature T_c of SrTiO₃ in the over-doped regime based on the first-principles calculations
CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics
Kobe, Japan (2023.8.4-8) No.PS2-12 (Poster)
Riku Ikaida, Kazuhiro Sano, Yoshimi Masuda, Takuya Sekikawa and Yoshiaki Ōno

32. Computational Analysis of Al Site-Directing Ability of Organic Structure-Directing Agents in FER and CHA Zeolites
Gordon Research Seminar Nanoporous Materials and Their Applications
New Hampshire, United States (2023.8.5) (Poster)
Kota Oishi
33. First-principles study on stability of intermetallic phases in Cr-alloy coated Zr-alloy cladding of nuclear fuel
21st International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems-Water Reactors (ENVDEG2023)
St. John's, Newfoundland, Canada (2023.8.6-10) No.63 (Oral)
Ying Chen, Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran and Hiroaki Abe
34. Computational Analysis of Al Site-Directing Ability of Organic Structure-Directing Agents in FER and CHA Zeolites
Gordon Research Conference, Nanoporous Materials and Their Applications
New Hampshire, United States (2023.8.6-11) (Poster)
Kota Oishi
35. Universal Origin of Boson Peak Vibrational Anomalies in hexagonal and low density amorphous ices
The 9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (9IDMRCS)
Makuhari Messe, Chiba, Japan (2023.8.12-18) (Oral)
Rodion V. Belosludov, Kirill V. Gets, Ravil K. Zhdanov, Yulia Yu. Bozhko and Vladimir R. Belosludov
36. Low-Temperature Sintering of TiB₂ Assisted by Mechanically Alloyed Ti-B Eutectic Aids
11th International Conference on High Temperature Ceramic Matrix Composites (HT-CMC11)
Jeju, Korea (2023.8.27-31) No.13-0495 (Oral)
Yuki Jimba, Sosuke Kondo, Hao Yu, Yasuki Okuno and Ryuta Kasada

37. Low-temperature densification of TiB_2 using Ti-based ball-milled additive
International Conference on Sintering 2023 (Sintering2023)
Gifu, Japan (2023.8.27-31) No.1P-41 (Poster)
Y. Jimba, S. Kondo, Okuno, H. Yu and R. Kasada
38. Core structure and Peierls stress of basal dislocations in a Ti_3SiC_2 MAX phase
determined by machine-learning interatomic potentials
JSME-KSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2023
Soul, Korea (2023.8.29-31) (Invited)
Hajime Kimizuka and Rana Hossain
39. Detailed molecular conformational changes and electronic structure of DNA irradiated
with low-energy radiation based on first-principles calculations
21st International Conference on Radiation Effects in Insulators
Fukuoka, Japan (2023.9.3-8) No.PA58 (Poster)
Takuya Sekikawa, Y. Matsuya, T. Kai, H. Kawai, H. Beomju, M. Ishizaka, Y. Ōno
and T. Sato
40. Reaction of Size-Selected Iron-Oxide Cluster Cations with Methane: A Model Study of
Chemical Processes in Mars' Atmosphere
21th International Symposium on Small Particles and Inorganic Cluster
(ISSPICXXI)
Berlin, Germany (2023.9.3-8) No.HT8 (Invited)
M. Arakawa, S. Kono, Y. Sekine and A. Terasaki
41. Development of MnO_2 -based Cathode Materials for Rechargeable Magnesium Batteries
74th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry
Lyon, France (2023.9.3-8) (Oral)
Xiatong Ye, Hongyi Li, Kohei Shimokawa, Takuya Hatakeyama and Tetsu Ichitsubo
42. Solvation Structure Modification in Dual-Cation Electrolytes for Dendrite-free Alkali
Metal Electrodeposition
74th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry
Lyon, France (2023.9.3-8) No.S04-P-061 (Poster)
Hongyi Li, Masaki Murayama and Tetsu Ichitsubo

43. Transport and Reactions at Liquid Interfaces
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.5C1-1I (Invited)
Akihiro Morita
44. Microscopic understanding of interface at liquid/solid-oxide and molecular adsorption on the surface by neural network potentials
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.8C1-5I (Invited)
Akira Nakayama
45. Probing chemical reaction dynamics through excited-state time-dependent GW simulations
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.5C2-3C (Oral)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
46. Effects of lateral interactions on surface chemical reactions revealed by kinetic Monte Carlo simulations with neural network potentials
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.8C1-4C (Oral)
Tomoko Yokaichiya
47. Deoxydehydration reaction by monomeric and dimeric molybdenum oxide catalysts supported on TiO_2 : A density functional theory study
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.5Po-73* (Poster)
Daiki Asada

48. Electronic State of Sumanene Derivative Bowl-Shaped Molecules
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry
(TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-44* (Poster)
Yuika Baba, Hidenori Sakurai and Azusa Muraoka
49. Optical Properties and Defect Structures of Double Perovskite Cs₂SnGeI₆
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry
(TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-56 (Poster)
Masanori Kaneko, Sana Kogure, Suzune Omori, Azusa Muraoka and
Koichi Yamashita
50. Long-Range Proton and Hydroxide Ion Transfer Dynamics at Water/CeO₂ Interface in
Nanosecond Regime: Molecular Dynamics Simulations with Neural Network Potential
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry
(TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-65 (Poster)
Tatsushi Ikeda
51. Computational analysis of Al site-directing ability of organic structure-directing agents
in FER and CHA zeolites
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry
(TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-66* (Poster)
Kota Oishi
52. Free energy analysis of nitrile hydration reaction using cerium oxide catalysts
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry
(TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-67* (Poster)
Takaaki Endo

53. Grand Canonical Monte Carlo Simulations for Hydrogen Adsorption on Metal Surfaces with Neural Network Potentials
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-68* (Poster)
Tomoya Kanno
54. Theoretical study on reaction mechanism of water splitting process on Cobalt-Oxo Cubane Clusters
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-70* (Poster)
Narumi Fujiwara, Koichi Yamashita and Azusa Muraoka,
55. Charge Separation Process in PTB7/BTAx Nonfullerene Organic Solar Cells
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-71 (Poster)
Sumire Ikeyama and Azusa Muraoka
56. Comparison of Charge Transfer Distance in PDCBT/BTA Non-Fullerene Organic Solar Cells
The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023)
Hokkaido University, Sapporo, Japan (2023.9.4-9) No.7Po-72* (Poster)
Yuzuka Minami, Sumire Ikeyama and Azusa Muraoka
57. Molecular insights into the formation of Natural Networking Structure in Natural Rubber: A Molecular Dynamics Simulation Study
The 7th International Soft Matter Conference, ISMC2023
Osaka, Japan (2023.9.4-8) (Oral)
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi

58. Effect of Strain Modulation on Gas Molecule Adsorption on Graphene using First-Principles Calculations
2023 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2023)
Nagoya, Japan (2023.9.5-8) No.SO-PS-08-04 (Poster)
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Ken Suzuki, Lei Wang and Hideo Miura
59. Heteroatom-Bridge-Type Planar Triphenylboranes: Synthesis and Exploiting Lewis Acid-Base Complexes and Photophysical Properties for Functions
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.08A7 (Invited)
Yuichi Kitamoto
60. “Design and synthesis of organic semiconductors incorporating electron-deficient quinoidal acenedichalcogenophenediones”
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.08D1 (Invited)
Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
61. Microscopic Understanding of Interface at Liquid/Solid-Oxide and Molecular Adsorption on the Surface by Neural Network Potentials
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.10D11 (Invited)
Akira Nakayama

62. Reactive Molecular Dynamics Simulations Elucidating the Impact of Carbon Nanotube (CNT) Defects on the Mechanical Properties of CNT/SiC Composites
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.10E2 (Invited)
Yixin Su, Shogo Fukushima, Yuta Asano, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
63. Magnetization of compositionally-graded Ru-substituted LSMO epitaxial thin films
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.1P011 (Poster))
Gaku Sato, Kenichi Kaminaga, Hiroshi Naganuma, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto
64. Carbazole-embedded N, N-bridge-type triphenylboranes: Synthesis and evaluation of delayed fluorescence
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.1P118 (Poster)
Nana Sakaida, Yuichi Kitamoto and Tetsutaro Hattori
65. Bromine-substituted trithienosubporphyrazines
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.2P107 (Poster)
Masashi Inoue, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya

66. Synthesis and properties of naphthodithiophenediimide-based non-conjugated polymers
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the
Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry
Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.2P158 (Poster)
Yo Hishinuma, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
67. Synthesis and properties of donor-acceptor π -conjugated polymers incorporating
benzodifuran-2,6-dione
International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the
Chemical Society of Japan (2023 Joint Meeting of the Tohoku Area Chemistry
Societies)
Sendai, Japan (2023.9.8-10) No.2P160 (Poster)
Shohei Wada, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
68. Strain Control of the Adsorption Behavior of NO₂ Molecule on Graphene: First-
Principles Calculations for the Development of Selective Multi-Gas Sensors
33rd International Conference on Diamond and Carbon Materials
Mallorca, Spain (2023.9.10-14) (Poster)
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Lei Wang, Ken Suzuki and Hideo Miura
69. Mapping of Kidney Stone by Far-Infrared Spectroscopy
48th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves
(IRMMW-THz 2023)
Montreal, Quebec, Canada (2023.9.17-22) No.Tu-PM1-2-5 (Oral)
V. C. Agulto, W. Zhao, M. Maruyama, M. Takahashi, K. Kato, V. K. Mag-usara,
M. Ota, Y. Tanaka, Y. Mori, M. Yoshimura and M. Nakajima
70. Breaking of superlubricity of epitaxial graphene by mechanochemical activation
64th German Tribology Conference 2023
Göttingen, Germany (2023.9.25-27) (Invited)
Kuwahara T., Szczefanowicz B., Filleter T., Klemenzen A., Mayrhofer L.,
Bennewitz R. and Moseler M.

71. Superlubricity of Silicon-based Ceramics Controlled by Interfacial Mechanochemistry
9th International Tribology Conference, Fukuoka 2023
Fukuoka International Congress Center, Fukuoka, Japan (2023.9.25-30)
No.27-A-10 (Invited)
Takuya Kuwahara, Yun Long, Jean Michel Martin, Maria-Isabel De Barros Bouchet,
Gianpietro Moras and Michael Moseler
72. Crystal structures of molecular semiconductors: control and prediction
Horizons symposium: Electronic & energy materials
Berlin, Germany (2023.9.25-26) (Invited)
Kazuo Takimiya
73. Control of the Adsorption Behavior of Gas Molecule on Graphene by Strain: First-Principles Calculations for Development of Multi-Gas Selective Sensors
International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD2023)
Kobe, Japan (2023.9.27-29) No.P-17 (Poster)
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Ken Suzuki, Hideo Miura and Lei Wang
74. Vacancy Ordering in Substoichiometric Zirconium Carbide
Materials Science & Technology 2023 (MS&T23)
Columbus, OH, USA (2023.10.1-4) (Invited)
Theresa Davey and Ying Chen
75. Ordering in Multi-principal Component UHTC Carbides
Materials Science & Technology 2023 (MS&T23)
Columbus, OH, USA (2023.10.1-4) (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
76. Thermodynamics of Cr-alloy Coated Zr-alloy Cladding Systems
Materials Science & Technology 2023 (MS&T23)
Columbus, OH, USA (2023.10.1-4) (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

77. Multidimensional Free Energy Analysis of Electron and Ion Transfer Reactions Through Immiscible Liquid Interfaces
6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS2023)
Taipei, Taiwan (2023.10.6-9) No.KG 1-1 (Keynote)
Akihiro Morita
78. Relationship between Surface States of Carbon Support and Electrode Reaction Activity in Cathode Catalyst Layer Toward High Power Output of Polymer Electrolyte Fuel Cells by Large-Scale Reactive Molecular Dynamics Simulations
244th ECS Meeting
Gothenburg, Sweden (2023.10.8-12) No.I01D-1996 (Oral)
T. Nakamura, Y. Asano, Y. Ootani, N. Ozawa and M. Kubo
79. First-principles analysis of anomalous transport phenomena and piezomagnetic effect in antiferromagnets
Topology, spin-orbit interactions and superconductivity in strongly correlated quantum materials under extreme conditions (H-Physics)
Grenoble, France (2023.10.9-12) (Invited)
Michi-To Suzuki
80. Microscopic mechanisms of ion transport and reactions at liquid-liquid interface
Exploration Conference "Interfaces and Mixing in Fluids, Plasmas, Materials", Kavli Institute for Theoretical Physics (KITP)
Santa Barbara, USA (2023.10.23-26) (Invited)
Akihiro Morita
81. Microscopic Understanding of Interface at Liquid/Solid-Oxide and Molecular Adsorption on the Surface by Neural Network Potentials
Structure and Dynamics of Chemical and Biomolecular Systems (SDCBS23)
Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur, India (2023.10.26-28) (Invited)
Akira Nakayama

82. Manipulation of Crystal Structures of Molecular Semiconductors: Rational Approach to High-performance Materials by Molecular Design
The Tenth RIKEN-NYCU Symposium on Physical and Chemical Sciences
Wako, Saitama, Japan (2023.10.26-27) (Invited)
Kazuo Takimiya
83. Evaluation of the behavior of long-lived fission product compounds in molten fluoride salts for the development of transmutation target
2023 Joint Symposium on Molten Salts
Kyoto, Japan (2023.11.12-16) No.P38 (Poster)
Hiroki Shishido and Hidetoshi Hashizume
84. First-principles calculations of DNA irradiated with a proton and a carbon ion beam
QUANTUM INNOVATIOM 2023, The International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation
Tokyo, Japan (2023.11.15-17) No.PO-SE-45 (Poster)
Takuya Sekikawa, Yusuke Matsuya, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ōno, Tatsuhiko Sato and Takeshi Kai
85. Elastic moduli and toughness of B1-type (Mo, Ti)C_x in Mo-Ti-C ternary system
PRICM11 (The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing)
Jeju, Korea (2023.11.19-23) No.O-C0717 (Oral)
Shuntaro Ida, Kotaro Yonemura, Kotaro Hosizaki, Xi Nan, Nobuaki Sekido and Kyosuke Yoshimi
86. Non-dendritic Electrodeposition of Alkali-Metal Anodes by Solvation Structure Modification in Dual-Cation Electrolytes
PRICM11 (The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing)
Jeju, Korea (2023.11.19-23) No.O-G0960 (Oral)
Hongyi Li and Tetsu Ichitsubo

87. Facilitating Multivalent Cation Diffusion in Cathode Materials by Concomitant Intercalation in Dual-Cation Electrolytes
PRICM11 (The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing)
Jeju, Korea (2023.11.19-23) No.O-G0975 (Oral)
Yue Qi, Hongyi Li and Tetsu Ichitsubo
88. Temperature dependent elastic properties of Mo-Ti BCC solid solutions by first principles calculation
PRICM11 (The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing)
Jeju, Korea (2023.11.19-23) No.P-N0234 (Poster)
Junfeng Du, Kyosuke Yoshimi and Nguyen-Dung Tran
89. Exploring Functional Antiferromagnetic Materials with Magnetic Structure Screening and First-Principles Calculation
Summit of Materials Science 2023 and GIMRT User Meeting 2023 (SMS2023)
Institute for Materials Research, Tohoku University (2023.11.20-22)
No.B-4 (Invited)
Michi-To Suzuki
90. Atomistic configurations in alloying materials: Group-III nitrides and high-entropy alloys
ACCMS Webinar
on-line (2023.11.28) No.#22 (Oral)
Hiroshi Mizuseki
91. The Cat-Universe: A “Data-Theory-Methodology-Experiment” Framework to Realize Catalyst Design
International Symposium on Green Transformation of Carbon Dioxide (ISGTCO2)
Brisbane, Australia (2023.11.29-12.1) No.19.2 (Invited)
Hao Li

92. Molecular Adsorption and Conversion at the Liquid/Solid-Oxide Interface by
Computational Approach
Nano Thailand 2023, Special session 2: Symposium on Bio-Based Chemicals &
Fuels from Lignocellulose 2023 (Hub of Knowledge)
Dusit Thani Pattaya, Chonburi, Thailand (2023.11.29-12.1) No.12E-INV-01 (Invited)
Akira Nakayama
93. Crystal structures of molecular semiconductors: control and simulation
14th Japan-China Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic
Solids and Related Phenomena
Nagoya, Japan (2023.12.7-9) No.1A02 (Invited)
Kazuo Takimiya
94. A “Data-Theory-Methodology-Experiment” Framework to Design Effective Materials
for Hydrogen Generation and Utilization
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.B3-O301-01 (Invited)
Akihiro Morita
95. Possible Superconducting State in Ir-doped Perovskite Manganese Oxides
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.D2-O402-05 (Invited)
Kenichi Kaminaga, Yuji Matsumoto and Shingo Maruyama
96. A Neural Network Simulation Method to Investigate Ion Behavior under External
Electric Fields: Applications to Crystalline and Amorphous Li_3PO_4
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.A5-O101-04 (Oral)
Koji Shimizu, Ryuji Otsuka and Satoshi Watanabe
97. First-principles calculations of thermoelectric properties of metastable ST12 germanium
allotrope
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.B1-O502-02 (Oral)
Han Meng, Masato Ohnishi, Meng An and Junichiro Shiomi

98. Investigating Correlation Effects on Cationic Conduction in Hydrides: A Comprehensive Study
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.B3-O401-02 (Oral)
Kartik Sau, Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Kazuaki Kisu, Ryuhei Sato and Shin-ichi Orimo
99. Synthesis of Complex Transition Metal Hydrides Containing Polynuclear Hydride Complexes with High Hydrogen Coordination
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.B3-O401-05 (Oral)
Shigeyuki Takagi, Takehiro Hashimoto, Kenjiro Otsuki, Reina Utsumi, Yuki Nakahira, Hiroyuki Saitoh and Shin-ichi Orimo
100. Stability and structural properties of transition metal high entropy alloys: from First-principles and machine learning
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.F1-O401-03 (Oral)
Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Chang Liu, Xinming Wang and Jun Ni
101. Prediction of density of states for multinary nanoalloys
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.A5-P501-11 (Poster)
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
102. Effect of off-stoichiometry on elastic moduli of B1-type MX_x ceramics
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.F1-P204-06 (Poster)
Hiromu Matsuura, Kotaro Hoshizaki, Shuntaro Ida and Kyosuke Yoshimi
103. Ti Substitution and Its Influence on the Elastic Properties of $\text{Mo}_5\text{SiB}_2\text{-T}_2$ Phase: A First Principles Study
MRM2023/IUMRS-ICA2023
Kyoto, Japan (2023.12.11-16) No.F1-P204-12 (Poster)
Nguyen-Dung Tran and Kyosuke Yoshimi

104. Molecular dynamics analysis of structural fluctuation, complexation, and electron transfer reaction at immiscible liquid interface

9th Asian Conference on Colloid and Interface Science 2023 (ACCIS 2023)

Hong Kong SAR, China (2023.12.12-15) (Invited)

Akihiro Morita

105. First-Principle Calculation of Piezoelectric Properties via Pr^{3+} Doping in $\text{Li}_{1-x}\text{Na}_x\text{NbO}_3$

The 4th International Conference on Mechanoluminescence and Novel Structural Health Diagnosis (ML-4)

Daegu, South Korea (2023.12.13-15) No.26 (Poster (Best Poster Award))

F. Guan, K. Hirata, T. Uchiyama, X.G. Zheng and C.N. Xu

< 2024 年 >

1. “Design and Synthesis” of Organic Semiconductor Crystals for Efficient Carrier Transport
CEMS International Symposium on Supramolecular Chemistry and Functional Materials 2024 (CEMSupra 2024)

The University of Tokyo, Japan (2024.1.18-19) No.L-05 (Invited)

Kazuo Takimiya

2. Recent Fundamental Progress in Molecular Dynamics Simulation

The 22nd International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD 2024)

Nakhon Ratchasima, Thailand (2024.1.21-24) No.KN-S6_O7 (Invited)

Yoshiyuki Kawazoe

3. First-principles calculations of defect structures in Sn perovskite solar cell materials

The Asia-Pacific International Conference on Perovskite, Organic Photovoltaics and Optoelectronics (IPEROP24)

Tokyo, Japan (2024.1.22-23) (Poster)

Mai Otake, Suzune Omori, Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita and Azusa Muraoka

4. Carbon vacancies in high-entropy UHTC carbides
48th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites (ICACC 2024)
Daytona Beach, FL, USA (2024.1.28-2.2) No.ICACC-S18-028-2024 (Invited)
T. Davey and Y. Chen
5. Neutron diffraction study on Co-based melilite compounds
The 46th Annual Condensed Matter and Materials Meeting
Wagga Wagga, Australia (2024.2.6-9) No.P6 (Poster Award) (Poster)
M. Kawamata, M. Avdeev and Y. Nambu
6. Calculation method for the coherence length at low temperatures
International Symposium on Quantum Electronics 2024
Ito International Research Center, The University of Tokyo (2024.2.13-16) (Poster)
H. Matsunaga, R. Oiwa, T. Nomoto and R. Arita
7. First-principles Alloy Design for Cr-alloy Coated Zr-alloy Cladding of Nuclear Fuel
6th Asian Zirconium Workshop
Tokyo, Japan (2024.2.20-22) No.O31 (Oral)
Ying Chen and Theresa Davey
8. Parameter-free and Predictable Molecular Dynamics Simulation
3rd International Conference on Materials Genome (ICMG-III)
SRM University-AP, India (2024.2.22-24) No.IL-25 (Invited)
Yoshiyuki Kawazoe
9. All-electron GW approach for light-element-doped anatase TiO_2 using TOMBO
ACCMS Webinar
on-line (2024.2.28) No.#24 (Oral)
Ryoji Sahara

10. Nonlinear coupling mediated by multi-magnon interactions in synthetic antiferromagnetic thin films
EIPBN, Women In Nanofabrication (WIN), WIN lecture series, WIN New Meeting Series
Virtual Meeting (2024.3.1) (Invited)
A. Sud, K. Yamamoto, H. Kurebayashi and S. Mizukami
11. First-principles-based Thermodynamic Database the Cr-Zr-X System Towards Design of Layered Accident Tolerant Nuclear Fuels
2024 TMS Annual Meeting & Exhibition
Orlando, Florida, USA (2024.3.3-7) (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
12. Reactive Molecular Dynamics Simulations Clarifying the Effect of Carbon Nanotube (CNT) Defects on Mechanical Properties of CNT/SiC Composites
2024 TMS Annual Meeting & Exhibition
Orlando, Florida, USA (2024.3.3-7) No.J-17 (Poster)
Yixin Su, Shogo Fukushima, Yuta Asano, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
13. Investigation of Mechanism for Heat Conduction Suppression in Si Thin-Films Due to Surface Roughness
American Physical Society March Meeting (APS March Meeting 2024)
Minneapolis, USA (2024.3.3-8) No.A12.2 (Oral)
Michimasa Morita and Junichiro Shiomi
14. Time-dependent GW molecular dynamics for an accurate mechanistic description of the dynamics of chemical reactions
American Physical Society March Meeting (APS March Meeting 2024)
Minneapolis, USA (2024.3.3-8) No.S59.5 (Oral)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
15. Memory-efficient incremental kernel ridge regression with a smart chunking strategy
American Physical Society March Meeting (APS March Meeting 2024)
Minneapolis, USA (2024.3.3-8) No.J00.339 (Poster)
Erickson Fajiculay, Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara and Chao-Ping Hsu

16. Computational and experimental studies in nanostructured carbon and metal hydride-based hydrogen storage systems

European Hydrogen Energy Conference (EHEC2024)

Bilbao, Spain (2024.3.6-8) No.ID355 (Poster)

K. Iyakutti, V.J. Surya, K. Ajaijawahar, A. Karthigeyan and Y. Kawazoe

IV. 予稿集

<2020 年>

1. 磁気対称性の破れとトポロジーが生み出す巨大輸送現象の研究
「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク」拠点 (Spin-RNJ)
2020 年度(令和 2 年度)年次報告会
オンライン (2021.3.9) No.O-8 (Oral)
鈴木通人

<2021 年>

1. Magnetic materials design by representation theory & first-principles calculation
東京大学物性研究所理論セミナー
オンライン (2021.7.9) (Invited)
鈴木通人
2. 準結晶における対称性適合な磁気構造の生成に向けた研究
新学術領域ハイパーマテリアル 第 6 回領域 Web 会議
オンライン (2021.7.13-15) (Oral)
鈴木通人
3. 磁気対称性の破れとトポロジーが生み出す輸送現象
第 141 回東北大学金属材料研究所講演会
オンライン (2021.11.30-12.1) (Oral)
鈴木通人

<2022 年>

1. 準結晶における対称性適合磁気構造の研究
新学術領域ハイパーマテリアル 第 8 回領域 Web 会議
オンライン (2022.4.18-20) (Oral)
鈴木通人
2. 強相関電子系の第一原理計算における一電子ポテンシャルと軌道異方性の研究
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-51 (Poster)
鈴木通人、星野晋太郎、池田浩章

3. 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
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
4. 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
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
5. 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
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)
朝田大生、池田龍志、村岡恒輝、中川善直、富重圭一、中山哲
6. 磁気対称性の破れとバンド縮退の分裂が生み出す輸送現象
先端基礎研究センター(ASRC)セミナー
茨城県那珂郡東海村 (2022.10.5) (Invited)
鈴木通人
7. 反応環境を考慮した触媒反応解析への取り組み
九州大学先導物質化学研究所講演会
九州大学筑紫キャンパス (2022.11.18) (Invited)
中山哲
8. Exploring the Role of Neutral Molecules in Closo-Type Metal Hydride Electrolytes by Genetic Algorithm Optimization and First-Principle Dynamics
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)
Campos Dos Santos Egon and Li Hao

<2023 年>

1. First-principles Study on Strain-induced Change of Adsorption Behaviors of NO₂ Molecules on Graphene
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 (+オンライン) (2023.3.15-18)
No.15a-PA01-28 (Poster)
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Lei Wang, Ken Suzuki and Hideo Miura
2. 架橋型トリアリールボランからなる熱活性化遅延蛍光材料の開発
応用物理学会 極限的励起状態の形成と量子エネルギー変換研究グループ
第 10 回研究会 (兼 第 26 回次世代先端光科学研究会)
仙台市 (2023.4.6-7) (Invited)
北本雄一、小川敦也、稲川雅也、高秀雄、北弘志、服部徹太郎
3. 量子系の時間発展をパラメータなしで追える TDGW 計算法の開発と適用
ナノ学会第 21 回大会
函館市民会館 (2023.5.11-13) No.1001 (Oral)
Manjanath Aaditya、佐原亮二、大野かおる、川添良幸
4. 全電子 *GW* 計算による軽元素添加 TiO₂ の電子状態計算
ナノ学会第 21 回大会
函館市民会館 (2023.5.11-13) No.P39 (Poster)
佐原亮二、石川立、大野かおる、上田恭介、成島尚之
5. Probing chemical reaction dynamics through excited-state time-dependent *GW* simulations
ナノ学会第 21 回大会
函館市民会館 (2023.5.11-13) No.P42 (Poster)
Aaditya Manjanath, Ryoji Sahara, Kaoru Ohn and Yoshiyuki Kawazoe
6. メチルチオ基による分子性半導体結晶の構造制御
23-1 超分子研究会 — π 共役系有機分子の合成・集合構造と機能—
中央大学後楽園キャンパス (2023.5.12) (Invited)
瀧宮和男

7. 吸着種間相互作用を取り込んだ kinetic Monte Carlo シミュレーション手法の開発：ニューラルネットワークポテンシャルの適用
第 25 回理論化学討論会
横浜市資生堂 S/PARK ホール/ オンライン (2023.5.16-19) No.1L05 (Oral)
八日市屋朋子、池田龍志、村岡恒輝、中山哲
8. 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
第 25 回理論化学討論会
横浜市資生堂 S/PARK ホール/ オンライン (2023.5.16-19) No.2P12 (Poster)
遠藤昂晶、池田龍志、村岡恒輝、中山哲
9. 分子動力学による Bi_2Te_3 - CsSnI_3 界面の熱伝導計算
第 60 回日本伝熱シンポジウム
福岡国際会議場 (2023.5.25-27) No.D124 (Oral)
小林風之介、王青、三浦飛鳥、矢吹智英、飯久保智、宮崎康次
10. 超低熱伝導ファンデルワールスヘテロ構造における斜め入射フォノンの抑制
第 60 回日本伝熱シンポジウム
福岡国際会議場 (2023.5.25-27) No.D125 (Oral)
Wenyang Ding, Zhun-Yong Ong, Meng An, Brice Davier, Shiqian Hu,
Masato Ohnishi and Junichiro Shiomi
11. First-principles calculations of thermoelectric properties of metastable ST12
germanium allotrope
第 60 回日本伝熱シンポジウム
福岡国際会議場 (2023.5.25-27) No.D211 (Oral)
孟涵、安盟、大西正人、塩見淳一郎
12. Engineering two-dimensional patterned graphene/h-BN heterostructures for extreme
thermal conductivity by machine learning
第 60 回日本伝熱シンポジウム
福岡国際会議場 (2023.5.25-27) No.D231 (Oral)
Meng An and Junichiro Shiomi

13. MD study of nano wear behavior of Ti in dry sliding on HAp considering effect of chemical reaction
日本材料学会第 72 期学術講演会
つくば国際会議場(2023.5.28-30) No.O01 (Oral)
Pham Dinh Dat、大塚雄市、宮下幸雄
14. 動的モンテカルロモデルに基づく点欠陥を含む B2 型 PdCu 合金の水素拡散特性の予測的評価
第 8 回マルチスケール材料力学シンポジウム
つくば国際会議場 (2023.5.28) No.P12 (Poster)
三津原晟弘、湯川宏、君塚肇
15. 吸着種を考慮したナノ合金の安定配置探索手法の開発と応用
日本コンピュータ化学会 2023 年春季年会
東京工業大学大岡山キャンパス (2023.6.1-2) No.1P06 (Poster)
難波優輔、古山通久
16. ニューラルネットワークを用いた電場中でのイオン挙動計算手法の開発：アモルファスリン酸リチウム中でのイオン伝導への応用
粉体粉末冶金協会 2023 年度春季大会 (第 131 回講演大会)
早稲田大学国際会議場 (2023.6.6-8) No.2-4 (Invited)
清水康司、大塚竜慈、渡邊聡
17. 含有不純物量の異なる半導体配線用 Cu めっき薄膜の弾性率
日本金属学会・日本鉄鋼協会・軽金属学会九州支部令和 5 年度合同学術講演会
くまもと県民交流館パレア (2023.6.10) No.D16 (Oral)
久家和浩、榊廉也、山室賢輝、連川貞弘
18. ニューラルネットワークポテンシャルによる大規模界面シミュレーションと粗視化速度論モデルによる解析
次世代若手研究者による応用計算・理論化学研究会 2023
筑波大学 (2023.7.25-26) (Oral)
池田龍志

19. 吸着種間相互作用を取り込んだ kinetic Monte Carlo シミュレーション手法の開発：
ニューラルネットワークポテンシャルの適用
次世代若手研究者による応用計算・理論化学研究会 2023
筑波大学 (2023.7.25-26) (Oral)
八日市屋朋子
20. Design and synthesis of molecular semiconductor solid: simple but impactful
methylthiolation
CEMS Topical Meeting on Chemistry of π -Conjugated Materials
Wako, Saitama (2023.7.31-8.1) (Invited)
瀧宮和男
21. Phonon-engineered extreme thermal conductivity of two-dimensional heterostructures
第7回フォノンエンジニアリング研究会
沖縄コンベンションセンター (2023.8.5-6) No.Sat-5 (Oral)
Meng An and Junichiro Shiomi
22. Suppression of phonon tunneling in van der Waals graphene-WS2 heterostructure with
ultralow thermal conductivity
第7回フォノンエンジニアリング研究会
沖縄コンベンションセンター (2023.8.5-6) No.Sat-6 (Oral)
Wenyang Ding, Zhun-Yong Ong, Meng An, Brice Davier, Shiqian Hu,
Masato Ohnishi and Junichiro Shiomi
23. First-principles calculations of thermoelectric properties of metastable ST12
germanium allotrope
第7回フォノンエンジニアリング研究会
沖縄コンベンションセンター (2023.8.5-6) No.Sat-7 (Oral)
Han Meng, Masato Ohnishi, Meng An and Junichiro Shiomi
24. 分子動力学法を用いたシリコン・ナノポーラス構造におけるフォノン輸送解析
第7回フォノンエンジニアリング研究会
沖縄コンベンションセンター (2023.8.5-6) No.Sat-8 (Oral)
大西正人、Yuxuan Liao、塩見淳一郎

25. ニッケル基アモルファス合金の 4D-STEM シミュレーション
金属第 63 回・鉄鋼第 66 回中国四国支部講演大会
徳島大学常三島キャンパス (2023.8.9-10) (Oral)
藤井晴雅、尾方成信、新里秀平、久保百司、井上喬仁、平山尚美、
太田元基、荒河一渡
26. TOMBO による全電子 GW 計算
金研ワークショップ「計算科学と情報学を用いた材料開発の新展開-2023
東北大学金属材料研究所 2 号館講堂 (2023.8.23-24) (Invited)
大野かおる
27. 磁性体の高性能な記述子の研究：磁気構造の精密な識別
金研ワークショップ「計算科学と情報学を用いた材料開発の新展開-2023
東北大学金属材料研究所 2 号館講堂 (2023.8.23-24) (Invited)
鈴木通人
28. ペンタ型 2 次元物質 MnS_2 の第一原理計算
金研ワークショップ「計算科学と情報学を用いた材料開発の新展開-2023
東北大学金属材料研究所 2 号館講堂(2023.8.23-24) (Oral)
篠原遥紀
29. 大規模言語モデルを活用した OSDA 設計及びその手法の確立
第 30 回ゼオライト夏の学校
東京大学山中寮内藤セミナーハウス (2023.9.4-5) (Poster)
伊東周昌
30. PTB7/BTA 非フラーレン系有機太陽電池における電荷分離過程のエキシトンダイナミクス
2023 年光化学討論会
広島国際会議場 (2023.9.5-7) No.1S14 (Invited)
村岡梓
31. Near-infrared Absorbing Organic Semiconductors Based on Quinoidal
Acenedichalcogenophenediones
統合化学国際共同大学院(GP-Chem)キックオフシンポジウム
東北大学大学院理学研究科 (2023.9.6-7) (Invited)
Kohsuke Kawabata

32. 傾斜組成構造を有する La ドープ LiCoO_2 エピタキシャル薄膜の作製と電池特性評価

日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス (2023.9.6-8) No.1U06 (Oral)

神永健一、鈴木貫太、七澤太梧、安井伸太郎、丸山伸伍、松本祐司

33. B1 型 TiX_x の弾性率に及ぼす非化学量論性の影響

日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス (2023.9.6-8) No.2D20 (Oral)

松浦紘夢、井田駿太郎、吉見享祐

34. 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関する分子動力学解析

日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス (2023.9.6-8) No.2R27 (Oral)

斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、Surblys Donatas

35. 岩塩型 $\text{Nb}(\text{O}, \text{N})$ エピタキシャル薄膜の電気輸送特性評価

日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス (2023.9.6-8) No.2PB01pm (Poster)

長泰亨、神永健一、丸山伸伍、松本祐司

36. 岩塩型 NbO 薄膜の格子緩和がもたらす超伝導の発現

日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス (2023.9.6-8) No.2PB03pm (Poster)

木村凜太郎、長泰亨、神永健一、丸山伸伍、松本祐司

37. 原子力応用を目指した高融点ホウ化物の創製と評価(3)高融点ホウ化物の低温焼結実現に向けたボールミル処理 Ti 助剤の影響評価

日本原子力学会 2023 年秋の大会

名古屋大学東山キャンパス (2023.9.6-8) No.2A09 (Oral)

陣場優貴、奥野泰希、近藤創介、余浩、荻野靖之、笠田竜太

38. データ科学との融合による核燃料研究の新展開(3)UO₂のニューラルネットワークポテンシャルの作製
日本原子力学会 2023 年秋の大会
名古屋大学東山キャンパス (2023.9.6-8) No.2C03 (Oral)
小無健司、加藤信彦、森一樹、黒崎健
39. Cr 被覆型事故耐性燃料の開発(5)第一原理計算による材料設計および表面反応
日本原子力学会 2023 年秋の大会
名古屋大学東山キャンパス (2023.9.6-8) No.3A05 (Oral)
陳迎、Theressa Davey、山口正剛、中山哲、高鍋和広、阿部弘亨
40. コロナ禍におけるセミナーの実施状況の変化と課題—計算物質科学人材育成
コンソーシアムの活動を基にしたケーススタディー
日本工学教育協会 第 71 回年次大会・工学教育研究講演会
広島大学東広島キャンパス (2023.9.6-8) No.VS28 (Oral/録画登壇)
寺田弥生
41. 有機構造規定剤がゼオライトのアルミニウム配置に与える影響の理論的研究
化学工学会第 54 回秋季大会
福岡大学七隈キャンパス (2023.9.11-13) No.F115 (Oral)
大石宏太、村岡恒輝、中山哲
42. BTA 系非フラーレン型有機薄膜太陽電池の電荷分離過程における振電相互作用
第 17 回分子科学討論会 2023 大阪
大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.2A15 (Oral)
池山すみれ、村岡梓
43. Ge アロイ化 Sn ペロブスカイトの光学物性と欠陥構造の第一原理計算
第 17 回分子科学討論会 2023 大阪
大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.2P027 (Poster)
金子正徳、小暮紗奈、大森鈴音、村岡梓、山下晃一

44. BTA 系非フラーレン型有機薄膜太陽電池における自由キャリア生成メカニズム

第 17 回分子科学討論会 2023 大阪

大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.3P029 (Poster)

南柚香、池山すみれ、村岡梓

45. Sn 系ペロブスカイト太陽電池材料の欠陥構造の第一原理計算

第 17 回分子科学討論会 2023 大阪

大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.3P031 (Poster)

大竹真愛、大森鈴音、金子正徳、山下晃一、村岡梓

46. 酸化コバルトキュバנקラスタールにおける酸素発生反応の理論的研究

第 17 回分子科学討論会 2023 大阪

大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.3P033 (Poster)

藤原成美、山下晃一、村岡梓

47. 積層構造におけるスマネン系誘導体の置換基効果に関する理論的研究

第 17 回分子科学討論会 2023 大阪

大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.3P063 (Poster)

馬場唯花、櫻井英博、村岡梓

48. ニューラルネットワークを用いた電解液の原子間ポテンシャルと電荷の評価手法の確立

第 17 回分子科学討論会 2023 大阪

大阪大学豊中キャンパス (2023.9.12-15) No.4P073 (Poster)

朝田大生、池田龍志、村岡恒輝、中山哲

49. 結晶構造シミュレーションによる有機半導体開発の試み

第 33 回基礎有機化学討論会

岡山コンベンションセンター (2023.9.12-14) No.2B07 (Oral)

瀧宮和男、Kirill Bulgarevich、堀内信吾

50. 配位性配向基を用いたリチオ化-ホウ素化反応による高色純度青色 TADF 性 N,N -架橋型トリフェニルボラン類の合成
第 33 回基礎有機化学討論会
岡山コンベンションセンター (2023.9.12-14) No.3B08 (Oral)
北本雄一、小川敦也、稲川雅也、小田一磨、高秀雄、北弘志、大井秀一、服部徹太郎
51. 機械学習による多元素ナノ合金の状態密度の予測
第 132 回触媒討論会
北海道大学札幌キャンパス (2023.9.13-15) No.1J23 (Oral)
難波優輔、古山通久
52. 反応分子動力学法を用いた固体高分子形燃料電池のカソード触媒層におけるプロトン伝導シミュレーション
第 132 回触媒討論会
北海道大学札幌キャンパス (2023.9.13-15) No.2J01 (Oral)
中村哲也、森海斗、福島省吾、蘇怡心、浅野優太、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
53. 傾斜組成 La ドープ LiCoO_2 エピタキシャル薄膜の電池特性評価
第 32 回新構造・機能制御と傾斜機能材料シンポジウム
東北大学青葉山新キャンパス (2023.9.14-15) No.14TJ-4 (Oral)
神永健一、鈴木貫太、七澤太梧、安井伸太郎、丸山伸伍、松本祐司
54. 放射線誘起正孔がもたらす DNA の分子構造と電子状態変化の第一原理計算
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.16aC205-3 (Oral)
関川卓也、ファン・ボンジュ、石坂優人、松谷悠佑、川井弘之、大野義章、佐藤達彦、甲斐健師
55. Polysilyne in two-dimensional flat sheet: A silicon-based Dirac material
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.16pA106-4 (Oral)
M. Takahashi

56. 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 II
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.17aA401-11 (Oral)
森田経介、川井弘之、伊海田陸、大野義章、佐野和博
57. 励起子絶縁体候補物質 Ta₂NiSe₅ のキャリアドーピング効果の研究 IV
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18pA401-15 (Oral)
土田駿、広瀬雄介、関川卓也、大野義章、摂待力生
58. 水中 PEG ネットワークが示す負のエネルギー弾性の全原子 MD 解析
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.19aA101-4 (Oral)
萩田克美、村島隆浩、長原颯太、酒井崇匡、作道直幸
59. 実習付きセミナーの有効性
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.19aC302-8 (Oral)
寺田弥生
60. 第一原理計算による電子ドーピングされた SrTiO₃ の強誘電量子臨界点近傍におけるフォノンのソフト化と超伝導転移温度
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.16pA404-15 (Poster)
伊海田陸、関川卓也、大野義章、佐野和博、栢田佳美
61. 第一原理計算に基づく貴金属ナノワイヤのベイン変形
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.17aPS-74 (Poster)
田村瑚治、小野頌太

62. 第一原理電子状態計算ソフト OpenMX の GPU による高速化と modified-DNA への応用
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.17pPSA-56 (Poster)
川井弘之、関川卓也、尾崎泰助、古家真之介、大野義章
63. 第一原理ハイブリッド汎関数法および動的平均場理論に基づく FeSe の電子状態
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18aPS-39 (Poster)
王宇、米山拓希、川井弘之、石塚淳、大野義章
64. 第一原理計算による V_3Si の電子・フォノン状態と超伝導転移温度の圧力依存性
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18aPS-50 (Poster)
米山拓希、川井弘之、大野義章
65. 動的平均場理論による電子-正孔 2 バンドハバード模型の励起子感受率と励起子相関
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18aPS-73 (Poster)
増澤翔大、佐々木健人、猪熊祐輔、大野義章
66. 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 II
日本物理学会 第 78 回年次大会
東北大学 (青葉山キャンパス、川内キャンパス) (2023.9.16-19)
No.18pPSA-82 (Poster)
猪熊祐輔、大野義章

67. Ir 置換ペロブスカイトマンガン酸化物における高温超伝導の可能性
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.23a-A307-1 (Invited)
神永健一、丸山伸伍、松本祐司
68. ニューラルネットワークを用いた電場印加下でのイオン挙動計算手法の開発：
結晶およびアモルファス Li_3PO_4 への応用
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.19p-C601-1 (Oral)
清水康司、大塚竜慈、渡邊聡
69. 分子性半導体の結晶構造：制御と予測
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.21a-A303-5 (Oral)
瀧宮和男、Kirill Brugalevich
70. In-silico crystallization (3): pitched π -積層と inclined brickwork 構造の類似性とシミュレーション
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.22a-D903-5 (Oral)
Bulgarevich Dmitrievich Kirill、瀧宮和男
71. Analysis of coherent phonon transport in Graphite with FeCl_3 intercalation
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.22p-C501-2 (Oral)
Yijia WU, Masato Ohnishi, Chandra Harsh, Jie Sun and Junichiro Shiomi
72. シリコン・ナノポーラス構造におけるフォノン輸送
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.22p-C501-10 (Oral)
大西正人、Yuxuan Liao、塩見淳一郎
73. Magnon-magnon coupling in synthetic ferrimagnets
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.23a-A201-9 (Oral)
Aakanksha Sud, Kei Yamamoto, Kazuya Suzuki, Shigemi Mizukami and Hidekazu Kurebayashi

74. 岩塩型 NbO 薄膜における格子歪制御による超伝導の発現
第 84 回応用物理学会秋季学術講演会
熊本城ホール (2023.9.19-23) No.20a-P02-19 (Poster)
木村凜太郎、神永健一、丸山伸伍、松本祐司
75. Thermodynamic Database of the Al-Nb-Ni Ternary System from First-principles Calculations
日本金属学会 2023 年秋期第 173 回講演大会
富山大学五福キャンパス (2023.9.19-22) No.165 (Oral)
Arkapol Saengdeejing, Ryoji Sahara and Yoshiaki Toda
76. 全電子 GW 計算による軽元素添加ルチル型 TiO_2 の電子状態計算
日本金属学会 2023 年秋期第 173 回講演大会
富山大学五福キャンパス (2023.9.19-22) No.J3 (Oral)
佐原亮二、石川立、大野かおる、上田恭介、成島尚之
77. Mo 基および MoSiB 基合金における TiC 添加に伴う凝固組織および物性変化に関する研究
日本金属学会 2023 年秋期第 173 回講演大会
富山大学五福キャンパス (2023.9.19-22) No.S8.8 (奨励賞受賞講演) (Oral)
井田駿太郎
78. 機械学習による非化学量論 TiX_x の材料物性予測
日本金属学会 2023 年秋期第 173 回講演大会
富山大学五福キャンパス (2023.9.19-22) No.S8.11 (Oral)
松浦紘夢、井田駿太郎、吉見享祐
79. Investigation of iron-rich FeSi alloys by first-principles phase field and special quasirandom structure methods
第 47 回日本磁気学会学術講演会
大阪大学豊中キャンパス (2023.9.27-29) No.27aA-3 (Invited)
Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Keisuke Fujisaki

80. 磁性体の高性能な記述子の研究：磁気構造の精密な識別
第 47 回日本磁気学会学術講演会
大阪大学豊中キャンパス (2023.9.27-29) No.29pE-6 (Oral)
鈴木通人、野本拓也、E. V. Morooka、柳有起、楠瀬博明
81. 高濃度合金における格子安定性と転位の運動過程に関する原子論的解析
日本機械学会 M&M2023 材料力学カンファレンス
筑波大学筑波キャンパス (2023.9.27-29) No.MM0320 (Oral)
君塚肇
82. 有機半導体研究 20 年を振り返って
名古屋大学トランスフォーマティブ化学生命融合研究大学院プログラム
GTR セミナー
名古屋大学工学部 (2023.10.13) (Invited)
瀧宮和男
83. Effect of impurity in the formation of end-group clusters in natural rubber:
Phenylalanine dipeptide as an impurity protein
第 71 回レオロジー討論会
愛媛県松山市 (2023.10.19-20) No.1B07 (Oral)
Mayank Dixit and Takashi Taniguchi
84. CGMD analysis on the change of molecular state under elongation deformation of
end-associated polymer system
第 71 回レオロジー討論会
愛媛県松山市 (2023.10.19-20) No.1B08 (Oral)
Shoma Fujii and Takashi Taniguchi
85. DESENVOLVIMENTO DE MODELO ANALÍTICO PARA DETECTAR NÃO
ALEATORIEDADE DE NÚCLEOS NO PROCESSO DE NUCLEAÇÃO DE
CRESCIMENTO
ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA
E COMPUTACIONAL (ERMAC-2023) & SIMPÓSIO 1 DÉCADA DO
PPG-MCCT
Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brazil (2023.10.30-11.1) No.706502 (Oral)
Isabelle Luize Siqueira Pinheiro, Wesley Luiz da Silva Assis and
Pedro Martins Menezes

86. SEGMENTAÇÃO DE IMAGENS DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DE TUMOR CEREBRAL UTILIZANDO MODELO 3D U-NET
ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL (ERMAC-2023) & SIMPÓSIO 1 DÉCADA DO PPG-MCCT
Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brazil (2023.10.30-11.1) No.707924 (Oral)
Erika Rocha de Araujo, Vanessa da Silva Garcia and Wesley Luiz da Silva Assis
87. Estudo De Um Pêndulo Paramétrico Com Mola Torcional De Liga Com Memória De Forma Para Colheita De Energia
ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL (ERMAC-2023) & SIMPÓSIO 1 DÉCADA DO PPG-MCCT
Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brazil (2023.10.30-11.1) (Poster)
Matheus Abrahão, Alberto Paiva and Wesley L. S. Assis
88. Neural network potential study of complex solid systems
2023 年日本表面真空学会学術講演会
名古屋国際会議場 (2023.10.31-11.2) No.1Fa03 (Invited)
Koji Shimizu and Satoshi Watanabe
89. Magnetization of compositionally-graded Ru-substituted LSMO epitaxial thin films
2023 年日本表面真空学会学術講演会
名古屋国際会議場 (2023.10.31-11.2) No.1Ga01 (Oral)
Gaku Sato, Kenichi Kaminaga, Hiroshi Naganuma, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto
90. Compositionally-graded epitaxial thin films of La-doped LiCoO₂ for lithium-ion secondary batteries
2023 年日本表面真空学会学術講演会
名古屋国際会議場 (2023.10.31-11.2) No.1Gp04 (Oral)
Kenichi Kaminaga, Kanta Suzuki, Daigo Nanasawa, Shintaro Yasui, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto

91. Electrical transport properties of rock-salt structured Nb(O, N) epitaxial thin films
2023 年日本表面真空学会学術講演会
名古屋国際会議場 (2023.10.31-11.2) No.1P37 (Poster)
Yasumichi Cho, Kenichi Kaminaga, Shingo Maruyama and Yuji Matsumoto
92. 表現論と第一原理計算による磁性体の物質設計
大阪公立大学工学研究科研究セミナー
大阪公立大学 (2023.11.2) (Invited)
鈴木通人
93. 第一原理フェーズフィールド法によるチタン合金の微細組織予測
第3回日本チタン学会 講演大会 (2023 年度)
オンライン (2023.11.2) No.7 (Oral)
佐原亮二、T.N. Pham、S. Bhattacharyya、桑原理一、大野かおる
94. Vacancy effect on the twinnability of Cu alloys: DFT study
日本銅学会第 63 回講演大会
名古屋市中小企業振興会館 (2023.11.2-4) No.14 (Oral)
Eun-Ae Choi
95. Al-Cu 合金中の転位運動に対する固溶原子と析出物の影響に関する原子論的解析
第 33 回材料フォーラム TOKAI
名古屋工業大学 (2023.11.6) (Poster)
金井健太、湯川宏、大戸達彦、君塚肇
96. テラヘルツ領域におけるシュウ酸カルシウム水和物の分光特性
第 32 回(2023 年度)日本赤外線学会研究発表会
関西大学梅田キャンパス (2023.11.9-10) No.P-12 (Poster)
趙王軒、V. C. Agulto、加藤康作、丸山美帆子、高橋まさえ、田中勇太郎、
森勇介、吉村政志、中嶋誠
97. Fresnel Dispersion in Sum Frequency Generation Spectroscopy
第 9 回 SFG 研究会
東京工業大学大岡山キャンパス (2023.11.12-13) (Invited)
森田明弘

98. TiB-TiB₂ 複合材料の低温焼結に及ぼすボールミル Ti の影響
第 33 回日本 MRS 年次大会
横浜市 (2023.11.14-16) No.E-O15-001 (Oral)
陣場優貴、奥野泰希、近藤創介、余浩、荻野靖之、笠田竜太
99. ラマン質量分析法を用いた三酸素同位体比の測定は可能か
質量分析学会 同位体比部会 2023
青森県青森市 (2023.11.20) (Oral)
井上裕貴、荒川雅、山本順司
100. 非フラーレン型有機薄膜太陽電池における新規 NTz 系アクセプター材料の評価
日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P07 (Poster)
蘭暖佳、陣内青萌、家裕隆、村岡梓
101. 第一原理計算を用いた Sn 系ペロブスカイト太陽電池材料の欠陥構造の解析
日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P09 (Poster)
大竹真愛、大森鈴音、金子正徳、山下晃一、村岡梓
102. 機械学習モデルを用いた非フラーレン型有機薄膜太陽電池のアクセプター材料探索
日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P11 (Poster)
指方美希、金子正徳、村岡梓
103. Exploration of Cation Mixing in LiNi_xCo_yMn_{1-x-y}O₂: Combination of Multicanonical Sampling and Universal Neural Network Potential
日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P13 (Poster)
Tien Quang Nguyen and Michihisa Koyama

104. 汎用ニューラルネットワークポテンシャルと生成モデルによる高活性触媒表面の自動探索

日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P15 (Poster)
久間馨、石川敦之、Aspera Susan Menez、古山通久

105. Li 媒介アンモニア合成反応機構に関する理論研究

日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
レクザムホール、高松 (2023.11.24-26) No.2P20 (Poster)
岡村千奈美、村岡梓、山下晃一

106. Toward a better understanding of the self-organized state of molecular semiconductors

AIMR Workshop 2023
仙台 (2023.11.27) (Oral)
瀧宮和男

107. ニッケルマンガン酸リチウムの充放電反応機構と電池特性に与えるハイエントロピー効果 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_{2-x}\text{F}_x/\text{EC-DMC}$ 電解液界面の相間イオン拡散ダイナミクス解析

第 64 回電池討論会
大阪国際会議場、大阪 (2023.11.28-30) No.3D03 (Oral)
是津信行、角田健輔、近藤碧海、Otal Eugenio H.、Nguyen Quang、Taboroshi Attila、Louvain Nicolas、古山通久

108. Enhancing structural stabilization and electrochemical performance of $\text{NaNi}_{0.3}\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_2$ by Yttrium doping

第 64 回電池討論会
大阪国際会議場、大阪 (2023.11.28-30) No.3F03 (Oral)
T. Chen, E. H. Otal, T. Q. Nguyen, M. Koyama and N. Zettsu

109. XAS and in-situ XAS study of $\text{Na}_{1-x}\text{Fe}_{0.4}\text{Mn}_{0.3}\text{Ni}_{0.3}\text{Y}_x\text{O}_2$ (FNM-Y) cathode material for sodium-ion batteries

第 64 回電池討論会
大阪国際会議場、大阪 (2023.11.28-30) No.3F14 (Oral)
E. H. Otal, T. Chen, T. Q. Nguyen, M. Koyama and N. Zettsu

110. B1 型 $\text{Ti}(\text{C}, \text{N}, \text{O})_x$ の材料物性に対する非化学量論効果
第 4 回材料機能特性のアーキテクチャ研究会
沖縄県国頭郡宜野座村 (2023.12.3-5) (Oral)
松浦紘夢、井田駿太郎、吉見享祐
111. フラックス反応・分解を活用した低温化結晶育成プロセスの開拓 〜ルビー結晶成長モデルの深耕〜
第 52 回結晶成長国内会議 (JCCG-52)
ウインクあいち (2023.12.4-6) No.04a-A07 (Oral)
山田哲也、鮎沢俊輔、宮川博夫、大石修治、手嶋勝弥
112. The Cat-Universe: A “Data-Theory-Methodology-Experiment” Framework to Realize Catalyst Design
Seminar of The University of Adelaide
Australia (2023.12.5) (Invited)
Hao Li
113. 新しい第一原理計算とフェーズフィールド法の提案
第 145 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 (2023.12.6) No.研友会講演会 (Invited)
大野かおる
114. 非層状物質の原子層エンサイクロペディア
第 145 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 (2023.12.6) (Oral)
小野頌太
115. 結晶グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた酸素空孔形成エネルギーの予測
第 145 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 (2023.12.6) No.P-06 (Poster)
澁井千紗、清原慎、熊谷悠
116. 二次元 MoS_2 の不純物に関する第一原理計算
第 145 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 (2023.12.6) No.P-18 (Poster)
宮本伊武己、裴星旻、清原慎、熊谷悠

117. フラックスを反応駆動利用したルビー結晶の低温化育成
第 17 回日本フラックス成長研究発表会
物質・材料研究機構 (2023.12.7-8) No.2005 (Oral)
山田哲也、鮎沢俊輔、宮川博夫、大石修治、手嶋勝弥

118. Do's and Don'ts in Computational Catalysis
Seminar of The University of Sydney
Australia (2023.12.8) (Invited)
Hao Li

119. Fusing Theory and Experiments to Realize Materials Design
11th Early Career Researchers Ensemble Workshop
Tohoku University (2023.12.13) (Invited)
Hao Li

120. 生体用 Co-Cr-Fe-Ni-Mo 系合金における積層欠陥エネルギーの実験的・計算材料学的研究
2023 年度東北大学金属材料研究所共同研究ワークショップ 日本バイオマテリアル学会東北ブロック交流会
東北大学金属材料研究所 (2023.12.22) (Poster)
檜山快、植木洸輔、佐原亮二、上田恭介、成島尚之

<2024 年>

1. A new approach to spectroscopic microscopy using broadband illumination
光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP) 第 6 回シンポジウム
東京大学伊藤国際学術研究センター (2024.2.8) (Poster)
G. N. Tran, Katsumi Midorikawa and Eiji J. Takahashi
2. The Cat-Universe: A “Data-Theory-Methodology-Experiment” Framework to Realize Catalyst Design
Seminar of Department of Chemistry
Wayne State University, USA (2024.2.28) (Invited)
Hao Li

3. Simultaneous recovery of sample and diffraction imaging
理研シンポジウム：第 11 回「光量子工学研究」一次世代の光量子工学に向けてー (The 11th RAP Symposium)
Wako Campus, RIKEN (2024.2.29-3.1) (Poster)
G. N. Tran, Katsumi Midorikawa, and Eiji J. Takahashi
4. 電子ビーム積層造形におけるインプロセスモニタリング/フィードバック制御技術と自動プロセス設計システムの開発
第 17 回粉末積層 3D 造形技術委員会
埼玉県熊谷市 (2024.3.8) No.講演① (Oral)
青柳健大
5. MD study of fretting wear behavior of oxidized Ti in contact with Hap
日本機械学会北陸信越支部 2024 年合同講演会
富山県立大学射水キャンパス (2024.3.8-9) No.S0904 (Oral)
Pham Dinh DAT, Yuichi Otsuka and Yukio Miyashita
6. 近年の計算物質科学分野における博士号取得者数の推移に関する調査研究ー博士論文題目から見る博士の育成動向ー
日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.5 (Oral)
寺田弥生
7. The role of vacancy on the formation of deformation twins in Cu alloys
日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.43 (Oral)
Choi Eun-Ae and Han Seung Zeon
8. 遮熱コーティングの耐はく離性向上に対する活性元素添加効果の第一原理計算による検討
日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.70 (Oral)
根上将大、吉野哲生、佐原亮二、御手洗容子

9. Thermodynamic and Mechanical Properties of fcc-PtRh Alloys from First-principles Calculations

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.130 (Oral)
Arkapol Saengdeejing, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuyuki Higashino

10. Thermodynamics of doped Cr-Zr systems for accident tolerant nuclear fuels

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.131 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

11. 生体用 Co-Cr-Fe-Ni-Mo 系合金における加工硬化挙動の計算材料学的・実験的検討

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.141 (Oral)
檜山快、植木洸輔、佐原亮二、上田恭介、成島尚之

12. 第一原理計算による Pr-doped (Li,Na)NbO₃ の電子状態と力学特性の評価

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.295 (Oral)
内山智貴、関峰、加納楓、陳迎、鄭旭光、平田研二、徐超男

13. 銅配線の電気抵抗率に及ぼす粒界配置の影響

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.303 (Oral)
久家和浩、山室賢輝、連川貞弘

14. B1 型 Ti(C,N,O)_x の物性に対する非化学量論効果

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.P17 (Poster)
松浦紘夢、井田駿太郎、吉見享祐

15. アモルファス合金の変形プロセスの 4D-STEM シミュレーション

日本金属学会 2024 年春期(第 174 回)講演大会
東京理科大学葛飾キャンパス (2024.3.12-15) No.P109 (Poster)
藤井晴雅、尾方成信、新里秀平、久保百司、井上喬仁、太田元基、
平山尚美、荒河一渡

16. Mapping phase stability and vacancy ordering in high-entropy transition metal carbides MC_{1-x} ($0.5 \leq x \leq 1$)
日本セラミックス協会 2024 年年会
熊本大学 黒髪キャンパス (2024.3.14-16) No.1A24 (Invited)
Davey Theresa and Chen Ying
17. 二次元 MoS_2 の不純物に関する第一原理計算
日本セラミックス協会 2024 年年会
熊本大学 黒髪キャンパス (2024.3.14-16) No.3C09 (Oral)
宮本伊武己、ベ ソンミン、清原慎、熊谷悠
18. 結晶グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた酸素空孔形成エネルギーの予測
日本セラミックス協会 2024 年年会
熊本大学 黒髪キャンパス (2024.3.14-16) No.3C10 (Oral)
澁井千紗、清原慎、熊谷悠
19. 第一原理計算を用いた Pr-doped $(\text{Li,Na})\text{NbO}_3$ の電子構造と圧電特性の評価
日本セラミックス協会 2024 年年会
熊本大学 黒髪キャンパス (2024.3.14-16) No.3D10 (Oral)
内山智貴、関峰、加納楓、陳迎、鄭旭光、平田研二、徐超男
20. MgO 中の転位すべりに関する第一原理計算
日本セラミックス協会 2024 年年会
熊本大学 黒髪キャンパス (2024.3.14-16) No.3M21 (Oral)
清原慎、都留智仁、熊谷悠
21. 反応分子動力学法による固体高分子形燃料電池用炭素担体のメソ細孔の酸素輸送特性解析
化学工学会第 89 年会
大阪公立大学中百舌鳥キャンパス (2024.3.18-20) No.F222 (Oral)
中村哲也、森海斗、福島省吾、蘇怡心、浅野優太、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司

22. キノイド型ベンゾジカルコゲノフェンジオン骨格をもつドナー-アクセプターポリマーの合成と評価
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.C442-3am-06 (Oral)
和田将平、川畑公輔、瀧宮和男
23. 高色純度遅延蛍光を示す *O,O*-架橋型トリフェニルボラン：3,19 位の置換基変換による逆項間交差速度定数の向上
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.E1113-2pm-13 (Oral)
稲川雅也、北本雄一、藤本裕、越水正典、高秀雄、北弘志、大井秀一、服部徹太郎
24. キノイド構造を有する超電子供与性分子の合成と応用
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.E1113-3pm-05 (Oral)
松尾崇也、川畑公輔、瀧宮和男
25. Upward vibrational frequency shift due to electron-phonon polar-coupling interaction in $C_{12}H_{17}ClN_4OS \cdot HCl \cdot H_2O$ crystals
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.E1122-4am (Oral)
Masae Takahashi, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and Yuka Ikemoto
26. Electrolyte adsorption study on the different types of layered cathode surfaces of lithium-ion batteries with computational chemistry methods
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.H937-2pm-05 (Oral)
Attila Taborosi, Michihisa Koyama and Nobuyuki Zettsu
27. 汎用ニューラルネットワークポテンシャルと生成モデルを用いた高活性合金触媒の原子配置探索
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.H937-4pm (Oral)
久間馨、石川敦之、Aspera Susan Menez、古山通久

28. 放射線誘起正孔がもたらす DNA の分子構造と電子状態変化の第一原理計算 II
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.18aA1-6 (Oral)
関川卓也、Hwang Beomju、石坂優人、松谷悠佑、川井弘之、大野義章、
佐藤達彦、甲斐健師
29. 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 V
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.18aH2-5 (Oral)
土田駿、広瀬雄介、関川卓也、大野義章、摂待力生
30. ブロックコポリマーの相分離構造を自発的に形成する Kremer-Grest 粗視化 MD
モデルの検討
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.18pM2-5 (Oral)
萩田克美、村島隆浩
31. ニューラルネットワークポテンシャルによる部分結晶化 Li_3PS_4 でのイオン伝導
挙動解析
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.20aJ1-13 (Oral)
清水康司、渡邊聡
32. GPU による第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の高速化の検証
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.18pPSL-13 (Poster)
川井弘之、尾崎泰助、古家真之介、大野義章
33. 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 III
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.20pPSH-15 (Poster)
猪熊祐輔、大野義章

34. 動的平均場理論による電子-正孔 2 バンドハバード模型の励起子感受率と励起子相図 II
日本物理学会 2024 年春季大会
オンライン (2024.3.18-21) No.20pPSH-16 (Poster)
増澤翔大、佐々木健人、猪熊祐輔、大野義章
35. The Cat-Universe: A “Data-Theory-Methodology-Experiment” Framework to Realize Catalyst Design
Seminar of NIMS
国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS) (2024.3.21) (Invited)
Hao Li
36. Anomalous thermal transport of two-dimensional materials in contact with substrate
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.24a-12B-8 (Oral)
Sun Jie, Bin Xu, Rulei Guo and Junichiro Shiomi
37. 有機半導体「多単結晶膜」：単結晶デバイスの大面積化
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.24a-22B-8 (Oral)
Bulgarevich Dmitrievich Kirill、瀧宮和男
38. データ科学との融合による核燃料研究の新展開(9)UO₂ のニューラルネットワークポテンシャルの作製
日本原子力学会 2024 年春の年会
近畿大学東大阪キャンパス (2024.3.26-28) No.2E02 (Oral)
小無健司、加藤信彦、森一樹、黒崎健

V. 新聞記事

<2021 年>

1. 理論計算による高効率な磁気構造予測手法の開発に成功
東北大学 プレスリリース (2021.2.18)
<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2021/02/press20210218-01-theory.html>

<2023 年>

1. 反強磁性体におけるトポロジカルホール効果の実証に成功 ―磁気情報の新しい読み出し手法としての活用に期待―
東北大学 プレスリリース (2023.4.21)
<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2023/04/press20230421-02-topological.html>
2. 巨大な異常ホール効果を示す新しい反強磁性的物質を発見
神戸大学 プレスリリース (2023.10.17)
https://www.kobe-u.ac.jp/ja/news/article/2023_10_17_01/

VI. 雑誌等掲載解説記事

<2023 年>

1. 鉱物クラスターの反応研究で探る宇宙での化学過程
化学同人 月刊『化学』2023 年 8 月号, 78[8](2023.7) pp.70-71
荒川雅、寺寄亨
<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b630544.html>
2. ファンデルワールス力のメカニズムを分子レベルで解明
第一原理計算と SPring-8 の合わせ技で結晶を作らない材料の構造を明らかにする
SPring-8 NEWS, 114 号 (2023.12) pp.1-4
高橋まさえ
<http://www.spring8.or.jp/ja/sp8news>

VII. 学位取得

<博士>

1. 動的平均場理論による2バンド・ハバード模型のスピン-重項と三重項の超伝導
新潟大学大学院 自然科学研究科 数理物質科学専攻 物理学コース
猪熊祐輔
2. Design, Synthesis, and Applications of n-Type Dopants Based on Pyranilidene Structure
(ピラニリデン構造を基盤とするn型ドーパントの設計、合成、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
松尾崇也

<修士>

1. Desenvolvimento de modelo de inteligência artificial aplicado a day trading com criptoativos baseado em Double Deep Q-Learning
Universidade Federal Fluminense
Douglas de Oliveira
2. Estudo de um pêndulo paramétrico com mola torcional de liga com memória de forma para colheita de energia
Universidade Federal Fluminense
Matheus Abrahão
3. Simulação computacional e descrição analítica de nucleação e crescimento de segunda fase nas faces de rede elipsoidal
Universidade Federal Fluminense
Rafaella dos Santos Bonanni
4. インターカレーションによるグラファイトの熱伝導制御の解析
東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻
WU Yijia
5. NbO の岩塩型新奇相薄膜の超伝導
東北大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 原子・分子制御工学講座
木村凜太郎

6. 半導体配線の信頼性向上に向けた電解めっき Cu 膜の特性評価
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材料組織学講座
久家浩和
7. 室温強磁性 Ru ドープ(La, Sr)MnO₃ の傾斜組成薄膜の作製と評価
東北大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 原子・分子制御工学講座
佐藤岳
8. 酸化状態制御による分子結晶の構造多様化と機能性発現
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 錯体化学研究室
千葉湧太
9. 岩塩型 Nb(O, N)における第一原理計算とそのエピタキシャル薄膜の電気輸送特性
東北大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 原子・分子制御工学講座
長泰亨
10. 分子動力学法を用いたセルロースナノファイバーの熱伝導解析
東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻
林晃大
11. ナフトジチオフェンイミドから成る非共役ポリマーの合成と物性調査
東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座
菱沼陽
12. B1 型 Ti(C,N,O)_x の材料物性に対する非化学量論効果
東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻 ナノ材料物性学講座
松浦紘夢
13. 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
新潟大学大学院 自然科学研究科 数理物質科学専攻
森田経介

14. キノイド型ベンゾジカルコゲノフェンジオン骨格を有するドナー-アクセプター
型高分子半導体の合成と評価

東北大学大学院 理学研究科 化学専攻 境界領域化学講座

和田将平

VIII. 表彰

1. 傾斜組成 La ドープ LiCoO_2 エピタキシャル薄膜の電池特性評価
傾斜機能材料研究会
第 32 回新構造・機能制御と傾斜機能材料シンポジウム
FGMs 奨励賞 (2023.9.14)
神永健一、鈴木貫太、七澤太梧、安井伸太郎、丸山伸伍、松本祐司
2. 第一原理計算を用いた Sn 系ペロブスカイト太陽電池材料の欠陥構造の解析
日本コンピュータ化学会 2023 年秋季年会
優秀ポスター賞 (2023.11)
大竹真愛、大森鈴音、金子正徳、山下晃一、村岡梓
3. Theoretical Studies of on the Charge Transfer Distance in PDCBT/BTAx Non-Fullerene Organic Solar Cells
14th Ewha-JWU-Ochanomizu Joint Symposium 2023
Best presenter 賞 (2023.12)
Yuzuka Minami, Sumire Ikeyama and Azusa Muraoka

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249
2. 東北大学金属材料研究所構内図250
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図251