

令和 6 年 6 月 30 日現在

機関番号：82108

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05815

研究課題名（和文）理論・計算・データ科学による蓄電固体界面イオンダイナミクスの機構解明

研究課題名（英文）Theoretical, Computational &amp; Data Science Studies on Interface Ionics for Energy Storage

研究代表者

館山 佳尚（Tateyama, Yoshitaka）

国立研究開発法人物質・材料研究機構・エネルギー・環境材料研究センター・センター長

研究者番号：70354149

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 171,000,000円

研究成果の概要（和文）：全固体電池の基本要素である蓄電固体界面では、歪み・準安定相形成といった構造変調、界面準位変化といった電子的変調、および可動イオン状態の変調などにより、特異なイオンダイナミクスが現れる一方、そのメカニズムの理解は進んでいなかった。そこで我々は、電子・イオンに着目した第一原理・分子動力学計算、ミクロンレベルのメソスケール計算、および計測データを利用したAI解析等の先端技術の開発・融合を通して、蓄電固体界面科学の学理構築を試みた。その結果、界面における電子・イオン移動の新規知見に加え電気化学ポテンシャルを基軸とした理論や、非平衡定常状態の解析など世界初となる概念・手法の提案するに至った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

界面現象の理解はいまだに様々な分野において重要課題となっている。我々が提示した蓄電固体界面科学に関する新理論、新概念、新手法はこの蓄電固体に限らず界面イオニクス一般に対して重要な基礎的知見を与えるものになっている。またこの理論は全固体電池やスーパーキャパシタなど次世代エネルギー蓄積デバイスの基礎を担うものであり、カーボンニュートラル社会に向けた材料科学の進展に大きく貢献するものと考えられる。

研究成果の概要（英文）：The solid-state device interface, which is a fundamental element of all-solid-state batteries, exhibits unique ion dynamics due to structural modulation such as distortion and metastable phase formation, electronic modulation such as interface level change, and modulation of movable ionic states. Therefore, we have attempted to construct a scientific theory of interface ionics of solid-state device through the development and integration of advanced technologies such as first-principles and molecular dynamics calculations focusing on electrons and ions, micron-level mesoscale calculations, and AI analysis using measurement data. As a result, we have proposed world-first concepts and methods such as a theory based on electrochemical potentials and non-equilibrium steady-state analysis, in addition to new findings on electron and ion transfer at interfaces.

研究分野：計算材料科学、第一原理計算、電気化学、イオニクス、界面科学、蓄電池

キーワード：イオニクス 拡散 電気化学 第一原理計算 連続体計算 分子動力学計算 計測インフォマティクス  
データ駆動型AI解析

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

蓄電固体(例えば全固体電池材料など)の界面近傍では、バルク状態とは異なる、歪み・構造秩序低下・準安定相形成という構造変調、界面準位や電位変化といった電子的変調、イオン濃度・化学ポテンシャルなどの可動イオン状態の変調が起こり、それらが蓄電固体界面での特異なイオンダイナミクスを引き起こすこと古くから認知され、多くの研究が行われてきた。

しかし、それらの包括的な理論研究・実験研究は共に少なく、蓄電固体界面現象を体系的に説明する学理は確立していなかった。その要因として、界面の原子スケール物性(界面構造など)とメソスケール物性(電気二重層など)の両者を考慮するマルチスケールな考察が必要であること、半導体物理や電気化学などの既存の界面科学分野で余り扱われない界面構造変化や電子・イオン両者の界面移動などを考慮した理論がまだ未成熟なこと、が挙げられる。

しかし、本計画研究構想の時期には様々な蓄電固体デバイスの活用が見えつつある段階となり、界面科学の基礎的発展はもちろん、応用に向けた指導原理の確立が強く求められる状況となった。

### 2. 研究の目的

本計画研究(A03)では上記の課題を打破すべく、界面イオン移動や構造変化を考慮したナノスケールの先進的量子力学(第一原理)計算(担当: 館山、中山) それより長距離のイオン分布・輸送を高精度に記述可能なメソスケール計算(担当: 井上) そして計測データを利用したナノ・メソスケール電子・イオン物性AI解析によるマルチスケール解析を駆使し(担当: DAM、武藤)蓄電固体界面の平衡状態における構造・電子・可動イオン状態の解明、さらに電圧や圧力などの外部摂動が印加された際の定常状態イオンダイナミクスの理解を目標に設定した。

上記課題の認識のもと、下記の3つの研究項目を立ち上げた(図1)。

- 蓄電固体界面の構造および電子・イオンの平衡・定常状態の計算科学解析
- 計測データと連動した蓄電固体界面の電子・イオン状態のデータ駆動型AI解析
- 蓄電固体界面のイオンダイナミクスの機構解明

1、2において、各々の分野のエキスパートが複雑で多様な界面に対する先端的な計算・AI技術を確立し、計画研究実験グループで取り扱う界面等をモデルとして解析を実行する。特にA02の高度計測データと相互参照を行いながら、蓄電固体界面近傍の構造変調、電子・可動イオン変調を明らかにし、そこからイオン輸送・蓄積を支配する記述子の抽出を行う。3において、得られた知見を統合し界面イオン輸送・蓄積に関する機構解明・学理創出に取り組むことを計画した。

### 3. 研究の方法

本計画研究では(1)第一原理(DFT)計算、(2)分子動力学(MD)計算の手法開発および応用によるイオンおよび電子の微視的ダイナミクスの解明、(3)メソスケール計算による電解質・電極粒子の接合、応力・歪み効果とイオン輸送の関係の解明、(4)蓄電固体界面における高分解能STEM-EELS像のスパースモデリング適用による元素分布や特徴量の抽出、X線タイコグラフィーなどの2・3次元データ画像から重要特徴量の自動抽出などのAI手法の開発と応用による計測インフォマティクスアプローチ、(5)さらにマテリアルズインフォマティクスの王道である、計算・実験データをもとに機械学習手法(ベイズ最適化など)を用いた優れた材料予言の試み、といった現在の計算・データ材料科学の先端技術を駆使することで、蓄電固体界面の特異なイオン輸送・イオン集積挙動に関する新規描像の提案を目指した。

### 4. 研究成果

(1)ヘテロ固固界面の高効率サンプリング手法の開発<sup>1)</sup>:固液界面に比べてMD利用が困難で、適切な手法がなかった固固界面の安定イオン配置抽出に対して我々は、粒子群最適化手法(CALYPSO法)というAI手法を用いて、出現確率が高いヘテロ固固界面の高効率サンプリング計算手法(ヘテロ界面CALYPSO法)の開発に世界で初めて成功した。さらにこの手法を高精度DFT計算と組み合わせること

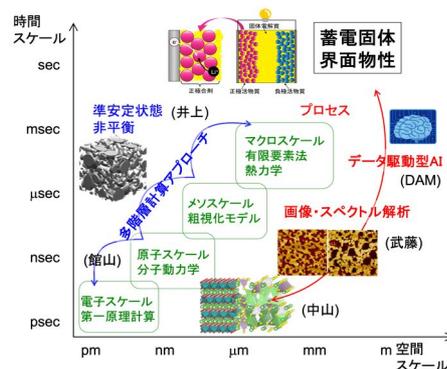


図1:蓄電固体界面物性の計算科学・データ科学アプローチの模式図、担当者

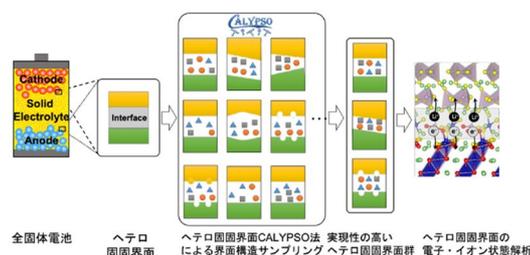


図2:ヘテロ界面CALYPSO法の模式図

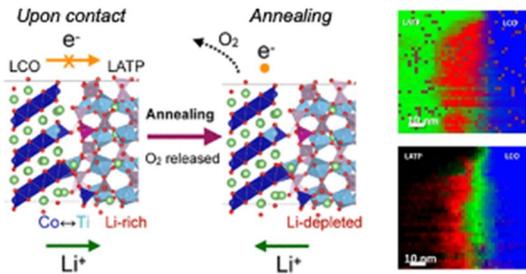


図 3: (左) 計算により示唆された LCO-LATP 界面のイオン・電子移動と (右) 同様の機構を示唆する STEM-EELS データ。

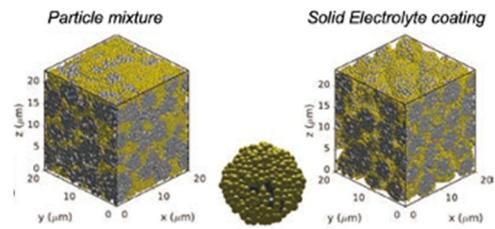


図 4: 固体電解質にコートされた電極活性物質を計算可能な離散有限要素手法 (DEM) モデルの模式図。

で、全固体電池の正極-コート層-硫化物固体電解質の劣化機構を明らかにした (図 2)。

(2) 正極-固体電解質界面におけるイオン・電子移動機構・計算-計測連携<sup>2,3</sup>: 本領域の標準モデル界面である  $\text{LiCoO}_2$  正極 /  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$  固体電解質界面 (LCO-LATP 界面) について、界面 DFT 計算および STEM-EELS のデータ AI 解析を通して、界面接合時およびアニール時の界面イオン移動・電子移動機構を明らかにした (図 3)。

(3) 応力効果・弾塑性変形を考慮したメソスケール計算手法開発<sup>4,5</sup>: 固体間接触とその応力

効果を考慮した弾塑性変形モデルを組み込んだ離散要素計算手法 (DEM) を新たに構築し、応力効果・塑性変形・体積膨張収縮を考慮したイオン輸送・電気化学反応解析が可能となった (図 4)。

(4) 実験データに関するデータ駆動型 AI 解析手法開発<sup>6,7</sup>: STEM-EELS/EDX 分析条件のノイズの取扱いの最適化によるデータ処理技術がほぼ確立し、界面近傍の原子スケール描像がクリアに得られるようになった。また計測 2-3 次元画像に包含されるイオン変調の特徴を自動的に発見できる AI 解析手法の適用も開始した (図 5)。

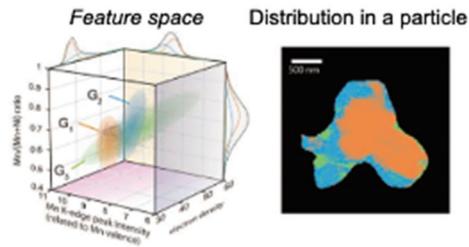


図 5: X 線タイコグラフィデータから特徴量 (酸化還元状態) を自動抽出し、更に粒子中における分布を提示。

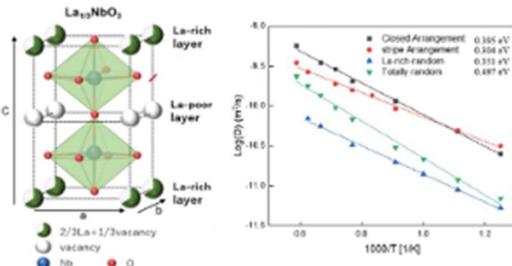


図 6: 作成した力場による  $\text{La}_{(1-x)/3}\text{Li}_x\text{NbO}_3$  固体電解質内の Li イオン拡散係数 MD 計算。

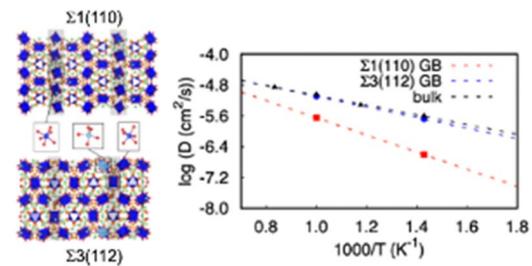


図 7: LLZO 酸化物固体電解質内の粒界における Li イオン拡散係数の大規模 DFTMD 計算。

(5) 高精度力場の開発と大規模イオンダイナミクスシミュレーションへの適用<sup>8-10</sup>: 第一原理計算を基準とした高精度力場ポテンシャルを開発し、より大きなスケールでのダイナミクス計算を行うことで、界面の原子構造・ダイナミクスの特徴を明らかにした (図 6)。

(6) 固体電解質材料内のイオン伝導機構の第一原理 MD 解析<sup>11,12</sup>: 様々なイオン間相互作用を高精度に記述できる DFT 計算を用いた大規模 MD にも数多く取り組み、硫化物超イオン伝導体の伝導機構や  $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$  (LLZO) ガーネット酸化物固体電解質の粒界近傍のイオン挙動・デンドライト機構について新規な知見をもたらした (図 7)。

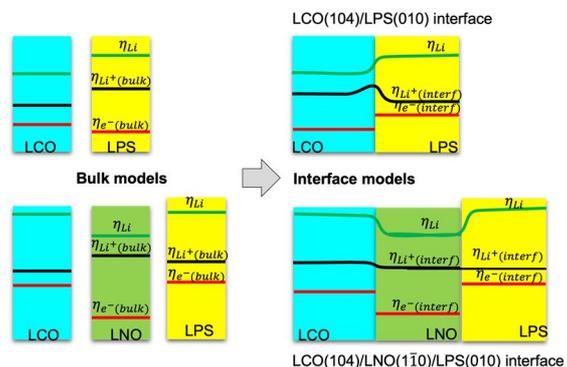


図 8: DFT に基づいた蓄電池材料内の Li 原子標準化学ポテンシャルと、 $\text{Li}^+$  および  $e^-$  標準電気化学ポテンシャルの再定義と、電気化学平衡による界面抵抗増減機構の提案。

(7) 微視的電気化学：標準電気化学ポテンシャル理論の提案<sup>12)</sup>：本計画研究で得られた様々な結果を統一的に理解する描像として、標準電気化学ポテンシャル理論を提案した。詳細についてはまだ議論の余地があるが、蓄電固体界面学理構築の第一歩となっている(図8)。

(8) 非平衡定常状態解析手法の開発と応用<sup>13,14)</sup>：イオン伝導度をより高効率に計算可能な非平衡 MD 法の開発を古典力場・第一原理の両レベルで実装し、粒界におけるイオン伝導挙動やイオン相関効果を明らかにした(図9)。これらの手法は非平衡定常状態解析の強力な武器となる。

以上のように、当計算・データ科学計画研究(A03)では、従来から行われている平衡状態の現象解析および様々な実験との連携をさらに進展させた上に、微視的スケールの学理構築や非平衡定常状態の解析まで展開し、当初の目標を十分達成するに至った(論文数95件、領域内連携25件)。

#### <引用文献>

- 1) B. Gao, Y. Tateyama *et al.*, Chem. Mater. 32 (2020) 85.
- 2) Y. Yamamoto, Y. Iriyama, S. Muto, J. Am Ceram. Soc. 103 (2020) 1454.
- 3) H.-K. Tian, S. Muto, Y. Iriyama, Y. Tateyama *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces 12 (2020) 54752.
- 4) M. So, G. Inoue *et al.*, J. Power Sources 530 (2022) 231279.
- 5) M. So, G. Inoue *et al.*, J. Electrochem. Soc. 168 (2021) 030538.
- 6) H. Uematsu, H. C. Dam, Y. Takahashi *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. 12 (2021) 5781.
- 7) S. Muto, Y. Tateyama, Y. Iriyama *et al.*, ACS Energy Mater. 5 (2022) 98.
- 8) R. Kobayashi, M. Nakayama *et al.*, APL Mater. 8 (2020) 081111.
- 9) Z. Yang, M. Nakayama *et al.*, J. Phys. Chem. C 125 (2021) 152.
- 10) Z. Yang, M. Nakayama *et al.*, Solid State Ion 366-367 (2021) 115662.
- 11) R. Jalem, A. Hayashi, Y. Tateyama *et al.*, Chem. Mater. 32 (2020) 8373.
- 12) B. Gao, Y. Tateyama *et al.*, Adv. Energy Mater. 12 (2022) 2102151.
- 12) B. Gao, Y. Tateyama *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces 13 (2021) 11765.
- 13) R. Kobayashi, M. Nakayama *et al.*, Acta Mater. 226 (2022) 117596.
- 14) R. Sasaki, Y. Tateyama *et al.*, npj Comput. Mater. 9 (2023) 48.

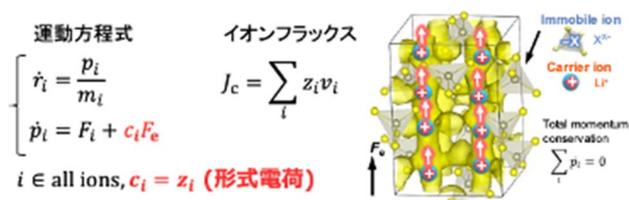


図9：化学色電荷(CCD)非平衡 MD 手法の基本方程式と、Li<sub>10</sub>GeP<sub>2</sub>S<sub>12</sub>を用いた計算概略図(右)。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計113件（うち査読付論文 113件 / うち国際共著 23件 / うちオープンアクセス 78件）

1. 著者名 Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 569
2. 論文標題 Evaluation of battery positive-electrode performance with simultaneous ab-initio calculations of both electronic and ionic conductivities	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Power Sources	6. 最初と最後の頁 232969
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2023.232969	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ryoma Sasaki, Bo Gao, Taro Hitosugi, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 9
2. 論文標題 Nonequilibrium molecular dynamics for accelerated computation of ion-ion correlated conductivity beyond Nernst-Einstein limitation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 npj Comput. Mater.	6. 最初と最後の頁 48
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-023-00996-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 127
2. 論文標題 EwaldSolidSolution: A High-Throughput Application to Quickly Sample Stable Site Arrangements for Ionic Solid Solutions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 5734-5744
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c00076	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Masahito Ikeda, Randy Jalem, Gen Hasegawa, Naoaki Kuwata, Qiumin Liu, Takafumi Yamamoto, Kei Shigematsu, Yoshitaka Tateyama, Masaki Azuma	4. 巻 127
2. 論文標題 Theoretical Prediction and High-Pressure Synthesis of New LISICON-Type Solid-State Electrolyte Li <sub>2</sub> .75[B <sub>0</sub> .625P <sub>0</sub> .125S <sub>0</sub> .25]O <sub>3</sub> .375	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 14117-14214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c02842	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Seong-Hoon Jang	4. 巻 127
2. 論文標題 Multi-objective solid electrolyte design of tetragonal and cubic inverse-perovskites for all-solid-state lithium-ion batteries by high-throughput DFT calculations and AI-driven methods	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 17307-17323
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c02801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wenchong Zhou, Chenchao Xu, Bo Gao, Masanobu Nakayama, Shunsuke Yagi, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 8
2. 論文標題 Glyme Solvent Decomposition on Spinel Cathode Surface in Magnesium Battery	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Energy Lett.	6. 最初と最後の頁 4113-4118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsenerylett.3c01084	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Randy Jalem, Manas Likhith Holekevi Chandrappa, Ji Qi, Yoshitaka Tateyama, Shyue Ping Ong	4. 巻 2
2. 論文標題 Lithium dynamics at grain boundaries of beta-Li3PS4 solid electrolyte	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Energy Adv.	6. 最初と最後の頁 2029-2041
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3YA00234A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Zizhen Zhou, Claudio Cazorla, Bo Gao, Huu Duc Luong, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 15
2. 論文標題 First-Principles Study on the Interplay of Strain and State-of-Charge with Li-Ion Diffusion in the Battery Cathode Material LiCoO2	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 53614-53622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acсами.3c14444	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Itsuki Konuma, Naohiro Ikeda, Benoit D.L. Campion, Hinata Fujimura, Jun Kikkawa, Huu Duc Luong, Yoshitaka Tateyama, Yosuke Ugata, Masao Yonemura, Toru Ishigaki, Taira Aida, Naoaki Yabuuchi	4. 巻 55
2. 論文標題 Unified understanding and mitigation of detrimental phase transition in cobalt-free LiNiO <sub>2</sub>	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Energy Storage Mater.	6. 最初と最後の頁 103200
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ensm.2024.103200	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Koki Matsunoshita, Yudai Yamaguchi, Masato Hamaie, Motoki Horibe, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Masayuki Karasuyama, Ryo Kobayashi	4. 巻 3
2. 論文標題 Optimization of Force-field Potential parameters using conditional variational autoencoder	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Sci. Tech. Adv. Mater.:Methods	6. 最初と最後の頁 2253713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2253713	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Lieven Bekaert, Suzuno Akatsuka, Naoto Tanibata, Frank De Proft, Annick Hubin, Mesfin Haile Mamme, Masanobu Nakayama	4. 巻 16
2. 論文標題 Increasing the Sodium Metal Electrode Compatibility with the Na <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> Solid-State Electrolyte through Heteroatom Substitution	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ChemSusChem	6. 最初と最後の頁 e202300676
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cssc.202300676	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Lieven Bekaert, Suzuno Akatsuka, Naoto Tanibata, Frank De Proft, Annick Hubin, Mesfin Haile Mamme, Masanobu Nakayama	4. 巻 127
2. 論文標題 Assessing the Reactivity of the Na <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> Solid-State Electrolyte with the Sodium Metal Negative Electrode Using Total Trajectory Analysis with Neural-Network Potential Molecular Dynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 8503-8514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c02379	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Masanobu Nakayama, Takuya Horie, Ryosuke Natsume, Shogo Hashimura, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Hirotaka Maeda, Masashi Kotobuki	4. 巻 127
2. 論文標題 Reaction Kinetics of Carbonation at the Surface of Garnet-Type Li7La3Zr2012 as Solid Electrolytes for All-Solid-State Li Ion Batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 7595-7601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08588	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yanjia Zhang, Miho Sawamura, Maho Harada, Yusuke Noda, Masanobu Nakayama, Masato Goto, Daisuke Kan, Yuichi Shimakawa, Benoit D.L. Campeon, Daisuke Shibata, Toshiaki Ohta, Naoaki Yabuuchi	4. 巻 127
2. 論文標題 Partially Reversible Anionic Redox for Lithium-excess Cobalt Oxides with Cation Disordered Rocksalt Structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 2194-2203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Y. Yamaguchi, T. Atsumi, K. Kanamori, N. Tanibata, H. Takeda, M. Nakayama, M. Karasuyama, I. Takeuchi,	4. 巻 13
2. 論文標題 Drawing a materials map with an autoencoder for lithium ionic conductors	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 16799
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-023-43921-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Aizu, N. Tanibata, H. Takeda, M. Nakayama	4. 巻 91
2. 論文標題 Characterization of a Novel Chloride Li-ion Conductor Li2LuCl5	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Electrochem.	6. 最初と最後の頁 117004-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/electrochemistry.23-00063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 N. Tanibata, K. Matsunoshita, H. Takeuchi, S. Akatsuka, M. Koga, H. Takeda, M. Nakayama	4. 巻 11
2. 論文標題 Fast Na-diffusive tin alloy for all-solid-state Na-based batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 25859-25864
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3TA02787B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Usami, N. Tanibata, H. Takeda, M. Nakayama	4. 巻 11
2. 論文標題 Analysis of ion conduction behavior of Nb-and Zr-doped Li3InCl6-based materials via material simulation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 APL Mater.	6. 最初と最後の頁 121107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0167817	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 N. Tanibata, N. Nonaka, K. Makino, H. Takeda, M. Nakayama	4. 巻 14
2. 論文標題 Chloride electrode composed of ubiquitous elements for high-energy-density all-solid-state sodium-ion batteries	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 2703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-024-53154-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tien-Sinh Vu, Minh-Quyet Ha, Duong-Nguyen Nguyen, Viet-Cuong Nguyen, Yukihiro Abe, Truyen Tran, Huan Tran, Hiori Kino, Takashi Miyake, Koji Tsuda, and Hieu-Chi Dam	4. 巻 9
2. 論文標題 Towards understanding structure-property relations in materials with interpretable deep learning	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 npj Comput. Mater.	6. 最初と最後の頁 215
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-023-01163-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shuntaro Takazawa, Duc-Anh Dao, Masaki Abe, Hideshi Uematsu, Nozomu Ishiguro, Taiki Hoshino, Hieu-Chi Dam, Yukio Takahashi	4. 巻 5
2. 論文標題 Coupling x-ray photon correlation spectroscopy and dynamic coherent x-ray diffraction imaging: Particle motion analysis from nano-to-micrometer scale	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Research	6. 最初と最後の頁 L042019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.5.L042019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 A. Kitajou, S. Hiroi, K. Ohara, K. Ikeda, T. Nanami, S. Muto	4. 巻 127
2. 論文標題 Cathode properties of xLiF-LiCrO <sub>2</sub> composites (x = 0-1.5) prepared by dry ball-milling method for lithium ion batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 2866-2874
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08419	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 H. Umemoto, S. Arai, H. Otobe, S. Muto	4. 巻 55
2. 論文標題 Stain-free mapping of polymer-blend morphologies via application of high-voltage STEM-EELS hyperspectral imaging to low-loss spectra	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Polym. J.	6. 最初と最後の頁 997-1006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41428-023-00786-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 10
2. 論文標題 Atomistic insight into the dopant impacts at the garnet Li <sub>7</sub> La <sub>3</sub> Zr <sub>2</sub> O <sub>12</sub> solid electrolyte grain boundaries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 10083-10091
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2ta00545j	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zizhen Zhou, Dewei Chu, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama, Claudio Cazorla	4. 巻 14
2. 論文標題 Tuning the Electronic, Ion Transport, and Stability Properties of Li-rich Manganese-based Oxide Materials with Oxide Perovskite Coatings: A First-Principles Computational Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 37009-37018
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.2c07560	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Seong-Hoon Jang, Yoshitaka Tateyama, Randy Jalem	4. 巻 32
2. 論文標題 High-Throughput Data-Driven Prediction of Stable High-Performance Na-Ion Sulfide Solid Electrolytes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Adv. Funct. Mater.	6. 最初と最後の頁 2206036
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adfm.202206036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 H. Yamada, K. Ohara, S. Hiroi, A. Sakuda, K. Ikeda, T. Ohkubo, K. Nakada, H. Tsukasaki, H. Nakajima, L. Temleitner, L. Pusztai, S. Ariga, A. Matsuo, J. Ding, T. Nakano, T. Kimura, R. Kobayashi, T. Usuki, S. Tahara, K. Amezawa, Y. Tateyama, S. Mori, A. Hayashi	4. 巻 0
2. 論文標題 Lithium Ion Transport Environment by Molecular Vibrations in Ion-Conducting Glasses	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Energy Environ. Mater.	6. 最初と最後の頁 e12612
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/eam2.12612	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yanjia Zhang, Miho Sawamura, Maho Harada, Yusuke Noda, Masanobu Nakayama, Masato Goto, Daisuke Kan, Yuichi Shimakawa, Benoit D.L. Campeon, Daisuke Shibata, Toshiaki Ohta, Naoaki Yabuuchi	4. 巻 127
2. 論文標題 Partially Reversible Anionic Redox for Lithium-excess Cobalt Oxides with Cation Disordered Rocksalt Structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 2194-2203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroko Fukuda, Shunya Kusakawa, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Masayuki Karasuyama, Ichiro Takeuchi, Takaaki Natori, Yasuharu Ono	4. 巻 12
2. 論文標題 Bayesian optimisation with transfer learning for NASICON-type solid electrolytes for all-solid-state Li-metal batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC. Adv.	6. 最初と最後の頁 30696-30703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RA04539G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hayami Takeda, Hiroko Fukuda, Koki Nakano, Syogo Hashimura, Naoto Tanibata, Masanobu Nakayama, Yasuharu Ono, Takaaki Natori	4. 巻 3
2. 論文標題 Process optimisation for NASICON-type solid electrolyte synthesis using a combination of experiments and bayesian optimisation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Mater. Adv.	6. 最初と最後の頁 8141-8148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2MA00731B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shuntaro Miyakawa, Shogo Matsuda, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Takaya Saito, Svetlana Fukuchi	4. 巻 12
2. 論文標題 Computational studies on defect chemistry and Li-ion conductivity of spinel-type LiAl <sub>5</sub> O <sub>8</sub> as coating material for Li-metal electrode	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-20289-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Naoto Tanibata, Shuta Takimoto, Shin Aizu, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama	4. 巻 10
2. 論文標題 Applying the HSAB Design Principle to the 3.5-V-class All-Solid-State Li-ion Batteries with a Chloride Electrolyte	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 20756-20760
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2TA05152D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masanobu Nakayama, Koki Nakano, Maho Harada, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Yusuke Noda, Ryo Kobayashi, Masayuki Karasuyama, Ichiro Takeuchi, Masashi Kotobuki	4. 巻 58
2. 論文標題 Na superionic conductor-type LiZr <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> as a promising solid electrolyte for use in all-solid-state Li metal batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 9328-9340
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC01526A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 R. Fukuma, M. Harada, W. Zhao, M. Sawamura, Y. Noda, M. Nakayama, M. Goto, D. Kan, Y. Shimakawa, M. Yonemura, N. Ikeda, R. Watanuki, H. L. Andersen, A. M. D'Angelo, N. Sharma, J. Park, H.-R. Byon, S. Fukuyama, Z. Han, H. Fukumitsu, M. Schulz-Dobrick, K. Yamanaka, H. Yamagishi, T. Ohta, N. Yabuuchi	4. 巻 8
2. 論文標題 Unexpectedly Large Contribution of Oxygen to Charge Compensation Triggered by Structural Disorder: Detailed Experimental and Theoretical Study on a Li <sub>3</sub> NbO <sub>4</sub> -NiO Binary System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Cent. Sci.	6. 最初と最後の頁 775-794
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.2c00238	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kosuke Kawai, Xiang-Mei Shi, Norio Takenaka, Jeonguk Jang, Benoit Mortemard de Boisse, Akihisa Tsuchimoto, Daisuke Asakura, Jun Kikkawa, Masanobu Nakayama, Masashi Okubo, Atsuo Yamada	4. 巻 15
2. 論文標題 Kinetic square scheme in oxygen-redox battery electrodes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Ener. Env. Sci.	6. 最初と最後の頁 2591-2600
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1EE03503G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zijian Yang, Masanobu Nakayama	4. 巻 91
2. 論文標題 Materials Simulation for the Modulated Arrangement in A-Site Deficient Perovskite-Type Lithium Doped Lanthanum Niobate as Solid Electrolytes for All Solid-State Li Ion Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Japan	6. 最初と最後の頁 91010
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Keita Nunoshita, Ryusei Hirate, Magnus So, Kayoung Park, Xuanchen LIU, Naoki Kimura, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 1
2. 論文標題 Simulation of All-Solid-State Lithium-Ion Batteries with Fastening Stress and Volume Expansion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Electrochem. En. Conv. Stor	6. 最初と最後の頁 44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4054015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Magnus So, Gen Inoue, Kayoung Park, Keita Nunoshita, Shota Ishikawa, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 530
2. 論文標題 Simulation of the compaction of an all-solid-state battery cathode with coated particles using the discrete element method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JOURNAL OF POWER SOURCES	6. 最初と最後の頁 231279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2022.231279	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chiyuri Komori, Shota Ishikawa, Keita Nunoshita, Magnus So, Naoki Kimura, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 4
2. 論文標題 Stress prediction of the particle structure of all-solid-state batteries by numerical simulation and machine learning	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Front. Chem. Eeg.	6. 最初と最後の頁 836282
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fceng.2022.836282	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Magnus So; Shinichiro Yano; Agnesia Permatasari; Thi Dung Pham; Kayoung Park; Gen Inoue	4. 巻 546
2. 論文標題 Mechanism of Silicon Fragmentation in All-Solid-State Battery Evaluated by Discrete Element Method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Power Sources	6. 最初と最後の頁 231956
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2022.231956	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Magnus So, Gen Inoue, Kayoung Park, Keita Nunoshita, Shota Ishikawa, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 9
2. 論文標題 Contact Model for DEM Simulation of Compaction and Sintering of All-Solid-State Battery Electrodes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 MethodsX	6. 最初と最後の頁 231279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mex.2022.101857	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 A. Kitajou, M. Yamashita, W. Kobayashi, M. Okada, T. Nanami, S. Muto	4. 巻 5
2. 論文標題 Anode Properties of NaTi <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Prepared by Adding Excess Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> for Aqueous Sodium-Ion Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 9587-9594
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.2c01212	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 A. Kitajou, S. Hiroi, K. Ohara, K. Ikeda, T. Nanami, S. Muto	4. 巻 127
2. 論文標題 Cathode properties of xLiF-LiCrO <sub>2</sub> composites (x = 0-1.5) prepared by dry ball-milling method for lithium ion batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry. C	6. 最初と最後の頁 2866-2874
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08419	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hirosuke Matsui, Nozomu Ishiguro, Yuanyuan Tan, Naoyuki Maejima, Yuta Muramoto, Tomoya Uruga, Kotaro Higashi, Duong-Nguyen Nguyen, Hieu-Chi Dam, Gabor Samjeske	4. 巻 8
2. 論文標題 Variation of Local Structure and Reactivity of Pt/C Catalyst for Accelerated Degradation Test of Polymer Electrolyte Fuel Cell Visualized by Operando 3D CT XAFS Imaging	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ChemNanoMat	6. 最初と最後の頁 e202200008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cnma.202200008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Minh-Quyet Ha, Duong-Nguyen Nguyen, Viet-Cuong Nguyen, Hiori Kino, Yasunobu Ando, Takashi Miyake, Thierry Denaeux, Van-Nam Huynh, Hieu-Chi Dam	4. 巻 133
2. 論文標題 Evidence-based data mining method to reveal similarities between materials based on physical mechanisms	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 53904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0134999	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yong Youn, Bo Gao, Azusa Kamiyama, Kei Kubota, Shinichi Komaba, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 7
2. 論文標題 Nanometer-size Na cluster formation in micropore of hard carbon as origin of higher-capacity Na-ion battery	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 npj Comput. Mater.	6. 最初と最後の頁 48
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-021-00515-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Masaki Matsui, Toshihiko Mandai, Hidetoshi Somekawa, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 9
2. 論文標題 Tuning the performance of a Mg negative electrode through grain boundaries and alloying toward the realization of Mg batteries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 15207-15216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ta02419a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama	4. 巻 33
2. 論文標題 First-Principles DFT study on Inverse Ruddlesden-Popper Tetragonal Compounds as Solid Electrolytes for All-Solid-State Li+-Ion Batteries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chem. Mater.	6. 最初と最後の頁 5859-5871
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c00124	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryoma Sasaki, Makoto Moriya, Yuki Watanabe, Kazunori Nishio, Taro Hitosugi, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 9
2. 論文標題 Peculiarly Fast Li-ion Conduction Mechanism in a Succinonitrile-Based Molecular Crystal Electrolyte: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 14897-14903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TA02809J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Le The Anh, Francesca Celine I. Catalan, Yousoo Kim, Yasuaki Einaga, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 23
2. 論文標題 Boron position-dependent surface reconstruction and electronic states of boron-doped diamond(111) surfaces: an ab initio study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 15628-15634
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp00689d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Randy Jalem, Bo Gao, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 10
2. 論文標題 Theoretical study on stability and ion transport property with halide doping of Na3SbS4 electrolyte for all-solid-state batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Mater. Chem. A	6. 最初と最後の頁 2235-2248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TA07292G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Bo Gao, Randy Jalem, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama	4. 巻 12
2. 論文標題 Revealing Atomic-Scale Ionic Stability and Transport around Grain Boundaries of Garnet Li7La3Zr2012 Solid Electrolyte	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Adv. Energy Mater.	6. 最初と最後の頁 2102151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aenm.202102151	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shunsuke Muto, Yuta Yamamoto, Miyuki Sakakura, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama, Yasutoshi Iriyama	4. 巻 5
2. 論文標題 STEM-EELS spectrum imaging of aerosol-deposited NASICON-type LATP solid electrolyte and LCO cathode interface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Appl. Energy Mater.	6. 最初と最後の頁 98-107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.1c02512	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Rinon Iwasaki, Kunihiro Ishida, Risa Yasuda, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Naoki Watanabe	4. 巻 -
2. 論文標題 Density Functional Theory Studies on Li Metal Electrode/Garnet-Type Li7La3Zr2012 Solid Electrolyte Interfaces for Application in All-Solid-State Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Phys Status Solidi B Basic Res	6. 最初と最後の頁 202100546
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100546	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryo Kobayashi, Koki Nakano, Masanobu Nakayama	4. 巻 226
2. 論文標題 Non-equilibrium molecular dynamics study on atomistic origin of grain boundary resistivity in NASICON-type Li-ion conductor	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Mater	6. 最初と最後の頁 117596
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.117596	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yusuke Sakai, Daisuke Urushihara, Toru Asaka, Koichiro Fukuda, Zijian Yang, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama	4. 巻 -
2. 論文標題 Octahedral Tilting and Modulation Structure in Perovskite-Related Compound La1/3NbO3	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Phys Status Solidi B Basic Res	6. 最初と最後の頁 202100561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100561	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kunihiro Ishida, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Takashi Teranishi, Naoki Watanabe	4. 巻 -
2. 論文標題 Density Functional Theory and Machine Learning-Based Analyses for Improved Surface Stability of a BaTiO <sub>3</sub> -Coated LiCoO <sub>2</sub> Positive Electrode Material	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys Status Solidi B Basic Res	6. 最初と最後の頁 202100526
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100526	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Ryo Kobayashi*, Masanobu Nakayama*, Naoki Watanabe	4. 巻 43
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of Li-Ion Conduction at Grain Boundaries in NASICON-Type LiZr <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Solid Electrolytes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 23604-23612
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c07314	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zijian Yang, Robyn E. Ward, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Ryo Kobayashi	4. 巻 366
2. 論文標題 Exploring the diffusion mechanism of Li ions in different modulated arrangements of La(1-X)/3LiXNbO <sub>3</sub> with fitted force fields obtained via a metaheuristic algorithm	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Solid State Ion	6. 最初と最後の頁 115662
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssi.2021.115662	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masanobu Nakayama	4. 巻 129
2. 論文標題 Materials informatics for discovery of ion conductive ceramics for batteries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Ceram. Soc. Jpn	6. 最初と最後の頁 286-291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2109/jcersj2.21030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masanobu Nakayama, Katsuya Nishii, Kentaro Watanabe, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Takanori Itoh, Toru Asaka	4. 巻 1
2. 論文標題 First-principles Study of the Morphology and Surface Structure of LaCoO <sub>3</sub> and La <sub>0.5</sub> Sr <sub>0.5</sub> Fe <sub>0.5</sub> Co <sub>0.5</sub> O <sub>3</sub> Perovskites as Air Electrodes for Solid Oxide Fuel Cells	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Adv. Mater. Method	6. 最初と最後の頁 24-33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1909871	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Gen Inoue, Hiroki Mashioka, Naoki Kimura, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 54
2. 論文標題 Identifying Parameters from Discharging and Relaxation Curves of Lithium-Ion Batteries Using Porous Electrode Theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Eng. Japan	6. 最初と最後の頁 207212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1252/jcej.20we180	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. So, G. Inoue, R. Hirate, K. Nunoshita, S. Ishikawa, Y. Tsuge	4. 巻 508
2. 論文標題 Effect of mold pressure on compaction and ion conductivity of all-solid-state batteries revealed by the discrete element method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 JOURNAL OF POWER SOURCES	6. 最初と最後の頁 230344
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2021.230344	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Keita Nunoshita, Ryusei Hirate, Magnus So, Kayoung Park, Xuanchen LIU, Naoki Kimura, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 1
2. 論文標題 Simulation of All-Solid-State Lithium-Ion Batteries with Fastening Stress and Volume Expansion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Electrochem. En. Conv. Stor	6. 最初と最後の頁 44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4054015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Magnus So, Gen Inoue, Kayoung Park, Keita Nunoshita, Shota Ishikawa, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 530
2. 論文標題 Simulation of the compaction of an all-solid-state battery cathode with coated particles using the discrete element method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JOURNAL OF POWER SOURCES	6. 最初と最後の頁 231279
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2022.231279	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chiyuri Komori, Shota Ishikawa, Keita Nunoshita, Magnus So, Naoki Kimura, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge	4. 巻 4
2. 論文標題 Stress prediction of the particle structure of all-solid-state batteries by numerical simulation and machine learning	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Front.Chem.Eeg.	6. 最初と最後の頁 836282
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fceng.2022.836282	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hideshi Uematsu, Nozomu Ishiguro, Masaki Abe, Shuntaro Takazawa, Jungmin Kang, Eiji Hosono, Nguyen Duong Nguyen, Hieu-Chi Dam, Masashi Okubo, Yukio Takahashi	4. 巻 12
2. 論文標題 Visualization of Structural Heterogeneities in Particles of Lithium Nickel Manganese Oxide Cathode Materials by Ptychographic X-ray Absorption Fine Structure	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 5781-5788
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.1c01445	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Minh-Quyet Ha, Duong-Nguyen Nguyen, Viet-Cuong Nguyen, Takahiro Nagata, Toyohiro Chikyow, Hiori Kino, Takashi Miyake, Thierry Denoeux, Van-Nam Huynh, Hieu-Chi Dam	4. 巻 1
2. 論文標題 Evidence-based recommender system for high-entropy alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Computational Science	6. 最初と最後の頁 470-478
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43588-021-00097-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Phuoc Nguyen, Truyen Tran, Sunil Gupta, Santu Rana, Hieu-Chi Dam, Svetha Venkatesh	4. 巻 1
2. 論文標題 Variational Hyper-encoding Networks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ECML PKDD	6. 最初と最後の頁 100-115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-86520-7_7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 M. Ohtsuka, K. Oda, M. Tanaka, S. Kitaoka, S. Muto	4. 巻 104
2. 論文標題 2D-HARECXs analysis of dopant and oxygen vacancy sites in Al-doped yttrium titanate	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Amer. Cer. Soc.	6. 最初と最後の頁 3760-3769
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.17764	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 武藤俊介, 志賀元紀	4. 巻 26
2. 論文標題 次元削減法とそのスペクトル解析への応用	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 32-40
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 So Magnus, Inoue Gen, Hirate Ryusei, Nunoshita Keita, Ishikawa Shota, Tsuge Yoshifumi	4. 巻 168
2. 論文標題 Simulation of Fabrication and Degradation of All-Solid-State Batteries with Ductile Particles	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of The Electrochemical Society	6. 最初と最後の頁 030538 ~ 030538
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ente.202001059	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sakakura Miyuki, Suzuki Yasuhiro, Yamamoto Takayuki, Yamamoto Yuta, Motoyama Munekazu, Iriyama Yasutoshi	4. 巻 9
2. 論文標題 Low Resistive LiCoO <sub>2</sub> /Li <sub>1.3</sub> Al <sub>0.3</sub> Ti <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Interface Formation by Low Temperature Annealing Using Aerosol Deposition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Energy Technology	6. 最初と最後の頁 2001059 ~ 2001059
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2021.229710	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Teranishi Takashi, Kozai Kaisei, Yasuhara Sou, Yasui Shintaro, Ishida Naoyuki, Ishida Kunihiro, Nakayama Masanobu, Kishimoto Akira	4. 巻 494
2. 論文標題 Ultrafast charge transfer at the electrode-electrolyte interface via an artificial dielectric layer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Power Sources	6. 最初と最後の頁 229710 ~ 229710
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.0c19091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Gao Bo, Jalem Randy, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 13
2. 論文標題 First-Principles Study of Microscopic Electrochemistry at the LiCoO <sub>2</sub> Cathode/LiNbO <sub>3</sub> Coating/ - Li <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> Solid Electrolyte Interfaces in an All-Solid-State Battery	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 11765 ~ 11773
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c02750	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yang Zijian, Suzuki Shinya, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Efficient Experimental Search for Discovering a Fast Li-Ion Conductor from a Perovskite-Type Li <sub>x</sub> La <sub>(1-x)</sub> 3NbO <sub>3</sub> (LLNO) Solid-State Electrolyte Using Bayesian Optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 152 ~ 160
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.0c16463	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tian Hong-Kang, Jalem Randy, Gao Bo, Yamamoto Yuta, Muto Shunsuke, Sakakura Miyuki, Iriyama Yasutoshi, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 12
2. 論文標題 Electron and Ion Transfer across Interfaces of the NASICON-Type LATP Solid Electrolyte with Electrodes in All-Solid-State Batteries: A Density Functional Theory Study via an Explicit Interface Model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 54752 ~ 54762
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052252520010088	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okuno Yukihiro, Haruyama Jun, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 3
2. 論文標題 Comparative Study on Sulfide and Oxide Electrolyte Interfaces with Cathodes in All-Solid-State Battery via First-Principles Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 11061 ~ 11072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2053-1583/abc08a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nu Thanh Ton Nhan, Ha Minh-Quyet, Ikenaga Takuma, Thakur Ashutosh, Dam Hieu-Chi, Taniike Toshiaki	4. 巻 8
2. 論文標題 Solvent screening for efficient chemical exfoliation of graphite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 2D Materials	6. 最初と最後の頁 015019 ~ 015019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c02318	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jalem Randy, Hayashi Akitoshi, Tsuji Fumika, Sakuda Atsushi, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 32
2. 論文標題 First-Principles Calculation Study of Na <sup>+</sup> Superionic Conduction Mechanism in W- and Mo-Doped Na <sub>3</sub> SbS <sub>4</sub> Solid Electrolytes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 8373 ~ 8381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aesr.202000025	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tanibata Naoto, Kato Masashi, Takimoto Shuta, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Sumi Hirofumi	4. 巻 1
2. 論文標題 High Formability and Fast Lithium Diffusivity in Metastable Spinel Chloride for Rechargeable All Solid State Lithium Ion Batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Energy and Sustainability Research	6. 最初と最後の頁 2000025 ~ 2000025
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0015977	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 武藤 俊介、志賀 元紀	4. 巻 55
2. 論文標題 スペクトラムイメージデータのノイズ処理と信号抽出の最近の進展	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 顕微鏡	6. 最初と最後の頁 60 ~ 64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0015373	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Ryo, Miyaji Yasuhiro, Nakano Koki, Nakayama Masanobu	4. 巻 8
2. 論文標題 High-throughput production of force-fields for solid-state electrolyte materials	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 081111 ~ 081111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0TA04441E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Harada Maho, Takeda Hayami, Suzuki Shinya, Nakano Koki, Tanibata Naoto, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Bayesian-optimization-guided experimental search of NASICON-type solid electrolytes for all-solid-state Li-ion batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 15103 ~ 15109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsmaterialslett.0c00127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tanibata Naoto, Takimoto Shuta, Nakano Koki, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Sumi Hirofumi	4. 巻 2
2. 論文標題 Metastable Chloride Solid Electrolyte with High Formability for Rechargeable All-Solid-State Lithium Metal Batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Materials Letters	6. 最初と最後の頁 880 ~ 886
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0007414	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakano Koki, Noda Yusuke, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Kobayashi Ryo, Takeuchi Ichiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Exhaustive and informatics-aided search for fast Li-ion conductor with NASICON-type structure using material simulation and Bayesian optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 041112 ~ 041112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c01350	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yang Zijian, Ward Robyn E., Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Asaka Toru	4. 巻 124
2. 論文標題 Arrangement in La1/3NbO3 Obtained by First-Principles Density Functional Theory with Cluster Expansion and Monte Carlo Simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9746 ~ 9754
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.9b23019	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Gao Bo, Jalem Randy, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 12
2. 論文標題 Surface-Dependent Stability of the Interface between Garnet Li7La3Zr2O12 and the Li Metal in the All-Solid-State Battery from First-Principles Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 16350 ~ 16358
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mattod.2020.03.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Yuki, Sawamura Miho, Kondo Sayaka, Harada Maho, Noda Yusuke, Nakayama Masanobu, Kobayakawa Sho, Zhao Wenwen, Nakao Aiko, Yasui Akira, Rajendra Hongahally Basappa, Yamanaka Keisuke, Ohta Toshiaki, Yabuuchi Naoaki	4. 巻 37
2. 論文標題 Activation and stabilization mechanisms of anionic redox for Li storage applications: Joint experimental and theoretical study on Li <sub>2</sub> TiO <sub>3</sub> -LiMnO <sub>2</sub> binary system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Today	6. 最初と最後の頁 43 ~ 55
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9EE04197D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sudayama Takaaki, Uehara Kazuki, Mukai Takahiro, Asakura Daisuke, Shi Xiang-Mei, Tsuchimoto Akihisa, Mortemard de Boisse Benoit, Shimada Tatau, Watanabe Eriko, Harada Yoshihisa, Nakayama Masanobu, Okubo Masashi, Yamada Atsuo	4. 巻 13
2. 論文標題 Multiorbital bond formation for stable oxygen-redox reaction in battery electrodes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Energy & Environmental Science	6. 最初と最後の頁 1492 ~ 1500
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP06608J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Baba Takeshi, Sodeyama Keitaro, Kawamura Yoshiumi, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 22
2. 論文標題 Li-ion transport at the interface between a graphite anode and Li <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> solid electrolyte interphase: ab initio molecular dynamics study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 10764 ~ 10774
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/denkikagaku.20-FE0005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 中山 将伸, 中野 高毅	4. 巻 88
2. 論文標題 4. データ科学と第一原理計算を活用した蓄電池用固体電解質の物性評価	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Denki Kagaku	6. 最初と最後の頁 21 ~ 27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2020.1724824	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Noda Yusuke, Otake Masanari, Nakayama Masanobu	4. 巻 21
2. 論文標題 Descriptors for dielectric constants of perovskite-type oxides by materials informatics with first-principles density functional theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 92 ~ 99
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2020.1730237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeda Hayami, Nakano Koki, Tanibata Naoto, Nakayama Masanobu	4. 巻 21
2. 論文標題 Novel Mg-ion conductive oxide of $\mu$ -cordierite Mg <sub>0.6</sub> Al <sub>1.2</sub> Si <sub>1.8</sub> O <sub>6</sub>	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 131 ~ 138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b03746	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakayama Masanobu, Ishida Kunihiro, Watanabe Kentaro, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Maeda Hirota, Kasuga Toshihiro	4. 巻 5
2. 論文標題 First-Principles Density Functional Theory Calculations for Formic Acid Adsorption onto Hydro-Garnet Compounds	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4083 ~ 4089
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.analchem.9b05321	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tanibata Naoto, Morimoto Riku, Nishikawa Kei, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu	4. 巻 92
2. 論文標題 Asymmetry in the Solvation-Desolvation Resistance for Li Metal Batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Analytical Chemistry	6. 最初と最後の頁 3499 ~ 3502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.analchem.9b05321	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 中野 高毅, 中山 将伸	4. 巻 50
2. 論文標題 全固体電池の開発におけるイオン伝導性セラミックスの材料探索	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 分離技術	6. 最初と最後の頁 11~17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamada Taiki, Ohtsuka Masahiro, Takahashi Yoshimasa, Yoshino Haruhiko, Amma Shin-ichi, Muto Shunsuke	4. 巻 9
2. 論文標題 Measurement of nanoscale local stress distribution in phase-separated glass using scanning transmission electron microscopy-cathodoluminescence	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materialia	6. 最初と最後の頁 100578 ~ 100578
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.015401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Assadi M. H. N., Okubo Masashi, Yamada Atsuo, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 4
2. 論文標題 Possible high-potential ilmenite type Na1M03(M=V-Ni) cathodes realized by dominant oxygen redox reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 015401~015401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.9b02311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Gao Bo, Jalem Randy, Ma Yanming, Tateyama Yoshitaka	4. 巻 32
2. 論文標題 Li+ Transport Mechanism at the Heterogeneous Cathode/Solid Electrolyte Interface in an All-Solid-State Battery via the First-Principles Structure Prediction Scheme	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 85 ~ 96
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/jmicro/dfz036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Muto Shunsuke, Shiga Motoki	4. 巻 69
2. 論文標題 Application of machine learning techniques to electron microscopic/spectroscopic image data analysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Microscopy	6. 最初と最後の頁 110 ~ 122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2019.148	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shiga Motoki, Muto Shunsuke	4. 巻 17
2. 論文標題 Non-negative Matrix Factorization and Its Extensions for Spectral Image Data Analysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 148 ~ 154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.16813	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yamamoto Yuta, Iriyama Yasutoshi, Muto Shunsuke	4. 巻 103
2. 論文標題 STEM EELS analysis of the interface structures of composite ASS LIB electrodes fabricated via aerosol deposition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 1454 ~ 1462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.16813	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計274件 (うち招待講演 100件 / うち国際学会 116件)

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 金属負極-電解質界面の計算科学研究動向
3. 学会等名 近化電池セミナー「金属負極二次電池の現状と展望」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Unravelling the Fast Li-ion Conduction Mechanism in Li(FSA)(SN)2 Molecular Crystal: A Molecular Dynamics Study
3. 学会等名 2023 Japan-Taiwan Nano Material and Biomedicine Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 理論計算によるイオン伝導度研究の最新動向
3. 学会等名 第24回超イオン導電体物性研究会 (第84回固体イオニクス研究会) (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Advanced DFT-MD Study on Ion Transport in Solid Electrolyte: Grain Boundary and Ion Correlation
3. 学会等名 IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Evaluation of Battery Positive-electrode Performance with Ab-initio Simultaneous Calculations of the Electronic and Ionic Conductivities
3. 学会等名 IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Designing Novel Antiperovskite-type Solid Electrolytes for All-solid-state Batteries by High-throughput DFT and Machine Learning
3. 学会等名 IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐々木遼馬、一杉太郎、館山佳尚
2. 発表標題 非平衡MD法による固体電解質のイオン相関を考慮したイオン伝導度計算の高速化
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤暖、張成燾、安東秀峰、門間聰之、館山佳尚
2. 発表標題 第一原理計算によるプルシアンブルー中の Li <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> イオン拡散機構の比較
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 電池内の電子・イオン移動に関する計算科学
3. 学会等名 第84回応用物理学会秋季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Advanced MD Study on Ion Transport in Battery Solid Electrolyte
3. 学会等名 Structure and Dynamics of Chemical and Biomolecular Systems (SDCBS23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Interface Chemistry and Ion Transport in Batteries Revealed by Advanced First-Principles Calculations
3. 学会等名 Japanese-German Joint Seminar on Sustainable Batteries (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zizhen Zhou, Claudio Cazorla Silva, Huu Duc Luong, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 First Principles Study on the Interplay of Strain and State of Charge with Li Diffusion in Lithium Cobalt Oxide Cathode Material
3. 学会等名 第49回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Evaluation of battery positive-electrode performance with simultaneous ab-initio calculations of both electronic and ionic conductivities
3. 学会等名 第49回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊藤暖、張成燾、安東秀峰、門間聰之、館山佳尚
2. 発表標題 プルシアンプルー中のLi+, Na+, K+ 拡散機構の第一原理計算による比較
3. 学会等名 第49回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 館山 佳尚、加賀爪 明子、八尾 勝、松田 翔一、魚崎 浩平
2. 発表標題 第一原理計算による高エネルギー密度有機正極活動質の探索と解析
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Qianli Si, Shoichi Matsuda, Youhei Yamaji, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Features from discharge/charge and relaxation to predict battery cycle life by machine learning
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zizhen Zhou, Claudio Cazorla, Duc Huu Luong, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 First-principles study on the interplay of strain and state-of-charge with Li-ion diffusion in the LiCoO <sub>2</sub>
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Randy Jalem
2. 発表標題 Theoretical study on the stability and synthesis of anion-substituted antiperovskite electrolytes
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 MIによる未知材料探索-蓄電池セラミックス研究を例として
3. 学会等名 令和5年度日本接着学会中部支部講演会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Computational Studies on Electrode/Electrolyte Interface in Battery
3. 学会等名 International Conference on Surface Engineering (ICSE2023)（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 計算科学・インフォマティクスの未来展望
3. 学会等名 第63回 電気化学セミナー 蓄電池の未来 -学術・技術・人材育成の展望-（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 ニューラルネットワークカ場を活用した蓄電池研究
3. 学会等名 第59回 熱測定討論会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kanato Oka, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Application of LSTM machine learning to battery emulators
3. 学会等名 Advanced Materials Research GRAND MEETING MRM2023 IUMRS-ICA2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 堀部元貴, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションを用いたリチウムイオン電池正極/電解液の界面反応解析
3. 学会等名 第49回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masato Hamaie, Yudai Yamaguchi, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Materials Optimization Using Grey Box Function
3. 学会等名 The 37th International Korea-Japan Seminar on Ceramics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 村上健斗, 山口雄大, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 SEM画像と畳み込みニューラルネットワークを用いたLiイオン伝導体の物性予測
3. 学会等名 日本セラミックス協会第36回秋季シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 武田はやみ, 福田紘子, 中野高毅, 橋村祥吾, 谷端直人, 中山将伸, 大野康晴, 名取孝章
2. 発表標題 実験とバイズ最適化を併用したLi過剰NASICON型固体電解質の合成プロセスの探索
3. 学会等名 日本セラミックス協会第36回秋季シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 応力場・電気化学反応場連成解析による全固体電池電極層の構造設計
3. 学会等名 第 60 回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 電池分野における計算科学の貢献
3. 学会等名 第60回化学関連支部合同九州大会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 江藤 佑樹, So Magnus, 森 雄輝, 矢野 振一郎, 井上 元
2. 発表標題 P膨張収縮を考慮した全固体電池の内部空隙の形成機構とその影響
3. 学会等名 化学工学会第54回秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 So Magnus, Permatasari Agnesia, Yano Shinichiro, Saito Yuki, Mori Yuk, Inoue Gen
2. 発表標題 Si Anode Expansion and its Performance Implications in All-Solid-State Batteries: A Modeling Approach
3. 学会等名 化学工学会第54回秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Magnus So, A. Permatasari, S. Yano, Y. Saito, Y. Mori, and G. Inoue
2. 発表標題 Understanding the Effect of Mechanical Degradation on the Performance of Solid-State Batteries through Particle Simulations
3. 学会等名 242nd ECS meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 Computer Simulation Technology for Design of Electrode Structure
3. 学会等名 2023 ICGET-TW (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 江藤 佑樹, So Magnus, Yuki Mori, Shinichiro Yano and Gen Inoue
2. 発表標題 Internal crack formation mechanism and its effect on all solid-state batteries considering expansion and contraction
3. 学会等名 ISChE 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Duong-Nguyen Nguyen, Hieu-Chi Dam
2. 発表標題 Query-and-learn Based Active Learning Framework for Screening New SmFe12 Structures
3. 学会等名 International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2023, Singapore (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Duc-Anh Dao, Shuntaro Takazawa, Masaki Abe, Hideshi Uematsu, Nozomu Ishiguro, Taiki Hoshino, Yukio Takahashi, Hieu-Chi Dam
2. 発表標題 A Framework to Investigate Motion Behaviors of Particles in Heterogeneous Media
3. 学会等名 International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2023, Singapore (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Minh-Quyét Ha, Duong-Nguyen Nguyen, Hieu-Chi Dam
2. 発表標題 An application of evidence theory revealing similarities between materials with respect to physical properties
3. 学会等名 International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2023, Singapore (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Tien-Sinh Vu, Minh-Quyet Ha, Duong Nguyen Nguyen, Hieu-Chi Dam
2. 発表標題 Deep Learning Reveals Where to Pay Attention to for Specific Materials' Properties
3. 学会等名 International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2023, Singapore (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hieu-Chi Dam
2. 発表標題 Towards Intuitively Interpretable AI in Materials Discovery: A Data-Driven Framework Emphasizing Material Similarity
3. 学会等名 MRM2023/IUMRS-ICA2023, Kyoto, Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Ofuji, S. Komai, K. Nakatani, M. Ohtsuka, S. Muto
2. 発表標題 Sparse modelling of extended energy-loss fine structure as a tool for probing nanometric local structure
3. 学会等名 The 20th International Microscopy Congress (IMC20) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 A. Ishizuka, M. Ohtsuka, S. Muto
2. 発表標題 Automating ALCHEMI at the nano-scale using software control
3. 学会等名 The 20th International Microscopy Congress (IMC20) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Muto
2. 発表標題 Seeking True Collaboration between Electron Microscopy and X-ray Spectroscopy by Materials Informatics
3. 学会等名 Mini-Symposium on Innovative Visualization for Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石塚顕在, 武藤俊介, 大塚真弘
2. 発表標題 ナノ電子プローブのソフトウェア制御による高角度分解電子チャネリング分光法の高度化
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第79回学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 名波拓馬, 喜多條鮎子, 廣井慧, 尾原幸治, 池田一貴, 武藤俊介
2. 発表標題 STEM-EELSによる $\text{Li}_{1+0.5x}(\text{Cr}_{1-1.5x}\text{Mnx})\text{O}_2$ 系正極材料の解析
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第79回学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 喜多條鮎子, 松田奨平, 武藤俊介
2. 発表標題 微細化 $\text{Li}_{1.2}\text{Cr}_{0.4}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_2$ の熱処理による結晶子サイズ変化がLiイオン電池特性に与える影響
3. 学会等名 第64回電池討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 スペクトラムイメージデータの持つ情報の「形」を可視化する-次元削減から次元拡張へ-
3. 学会等名 JST CREST[情報計測]「データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新」最終報告会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 第一原理計算による蓄電池界面現象の見える化
3. 学会等名 電気化学会電池技術委員会 新電池構想部会第116回講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama, Bo Gao
2. 発表標題 Standard Electrochemical Potential Analysis Based on DFT Interface Calculation: Microscopic Electrochemistry Framework
3. 学会等名 31st Topical Meeting of the ISE: Theory and Computation in Electrochemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Electron and Ion Transfer at Solid-Solid Interface: DFT-based Electrochemistry with Explicit Interface Model
3. 学会等名 IMLB 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Ion and Electron Transfer at Solid-Solid Interface: DFT Calculation Study with Explicit Interface Model
3. 学会等名 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI-23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 イオン伝導度の粒子系理論計算の最先端
3. 学会等名 第16回固体イオニクスセミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Z. Zhou, D. Chu, B. Gao, T. Momma, Y. Tateyama, C. Cazorla
2. 発表標題 Tuning the Electronic, Ion Transport and Stability Properties of Li-rich Manganese Based Oxides Cathode with Oxide Perovskite Coating
3. 学会等名 Psi-k 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Luong Huu Duc, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Electronic and ionic transports of layered oxide cathodes for lithium-ion batteries
3. 学会等名 Psi-k 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Seong-Hoon Jang, Yoshitaka Tateyama, Randy Jalem
2. 発表標題 Prediction of Na-ion sulfide solid electrolyte with high ion conductivity by using a multi-stage high-throughput screening technique
3. 学会等名 Psi-k 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT based ion transfer across interface in battery and microscopic electrochemistry concept
3. 学会等名 Psi-k 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Battery Electrolyte Exploration via Machine Learning Techniques Coupled with High-Throughput DFT Calculations
3. 学会等名 73rd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (73rd ISE) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 第一原理計算による全固体電池固体電解質のイオン伝導解析
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 カーボンニュートラル社会の実現に向けた電池材料の最先端計算・データ科学と「富岳」の活用
3. 学会等名 スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2022秋（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 スパコンがもたらす蓄電池現象の新たな理解
3. 学会等名 第8回大型実験施設とスーパーコンピューターとの連携シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚、高博、ハレム ランディ
2. 発表標題 ガーネット型固体電解質材料の粒界イオン伝導とそのドーパント効果に関する第一原理MD解析
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐々木遼馬、高博、一杉太郎、館山佳尚
2. 発表標題 非平衡分子動力学法による固体電解質のイオン-イオン相関を考慮したイオン伝導度計算の高速化
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 張成燾、館山佳尚、JALEM Randy
2. 発表標題 多段階ハイスループット計算による高イオン伝導度を持つナトリウム系硫化物固体電解質の予測
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 周子臻、Cazorla Claudio, 高博、門間聰之、館山佳尚
2. 発表標題 Li過剰マンガン酸化物正極-ペロブスカイト酸化物コート層界面の安定性・イオン物性に関する第一原理計算解析
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小泉健一、館山佳尚
2. 発表標題 62m水系カリウム濃厚電解液のイオン拡散に関する第一原理MD解析
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 JANG Seong-Hoon, 館山佳尚, JALEM Randy
2. 発表標題 多段階ハイスループット計算によるナトリウム系硫化物固体電解質の物質設計
3. 学会等名 第48回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚、高博、JALEM Randy
2. 発表標題 第一原理MD計算によるガーネット型固体電解質材料の粒界Liイオン伝導とそのドーバント効果
3. 学会等名 第48回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 第一原理計算
3. 学会等名 電気化学会関東支部第50回先端科学セミナー 電気化学のための計算化学入門 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 第一原理MD を用いた蓄電池のイオン伝導計算手法の開発と応用
3. 学会等名 「富岳」電池課題 第3回公開シンポジウム (成果報告会) (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT-based studies on “battery” issues
3. 学会等名 EU-Japan Workshop on High-Performance Computing (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Advanced DFT-MD study on Ion Transport in Solid Electrolyte: Grain Boundary and Ion Correlation
3. 学会等名 Japan-US Joint Seminar on Fundamentals of Next Generation Batteries (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 館山 佳尚、GAO Bo、JALEM Randy
2. 発表標題 酸化物固体電解質粒界における界面イオン伝導に関する第一原理MD解析
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会併設シンポジウム 全固体電池のプロセスサイエンス 第2回シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Naoto Tanibata, Masashi Kato, Shuta Takimoto, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Hirofumi Sumi
2. 発表標題 High deformability and fast lithium diffusivity in metastable spinel chloride for rechargeable all-solid state lithium ion batteries
3. 学会等名 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-1) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shin Aizu, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Ryo Kobayashi
2. 発表標題 Exhaustive Search for Chloride Li-Ion Conductors Using High-Throughput Force Field Molecular Dynamics Calculations
3. 学会等名 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yudai Yamaguchi, Risa Yasuda, Taruto Atsumi, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Drawing a materials map with autoencoder for Li conductive fluorides
3. 学会等名 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroko Fukuda, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Takaaki Natori, Yasuharu Ono
2. 発表標題 Compositional optimization of NASICON-type solid electrolyte using Bayesian optimization-guided experiments
3. 学会等名 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 材料計算によるリチウムイオン導電性セラミックスの解析と設計
3. 学会等名 第42回電子材料研究討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 汎用的な記述子の開発と大規模材料インフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会関西支部 2022年度 第24回若手フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 固体内酸素レドックス反応を利用したリチウムイオン電池と第一原理計算
3. 学会等名 第8回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Nakayama
2. 発表標題 Computational and informatics studies on NASICON-type Li ion conductor
3. 学会等名 Bunsen Colloquium New Horizons in Solid State Ionics on the occasion of the 68th birthday of Manfred Martin (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Nakayama, R. Iwasaki, N. Tanibata, H. Takeda
2. 発表標題 Computational studies on Li metal/garnet-type Li7La3Zr2O12 interface
3. 学会等名 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 高速力場計算を用いたLiイオン導電性材料の評価と探索
3. 学会等名 第116回 新電池構想部会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 データサイエンスを利用した全固体電池材料の効率的探索
3. 学会等名 光触媒第87回講演会「データサイエンス」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroko Fukuda, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Takaaki Natori, Yasuharu Ono
2. 発表標題 Optimization of NASICON-type solid electrolyte composition using both experiments and bayes optimization
3. 学会等名 Bunsen Colloquium New Horizons in Solid State Ionics on the occasion of the 68th birthday of Manfred Martin (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yudai Yamaguchi, Risa Yasuda, Taruto Atsumi, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Drawing a materials map with an autoencoder for all-solid state Li-ion batteries
3. 学会等名 Bunsen Colloquium New Horizons in Solid State Ionics on the occasion of the 68th birthday of Manfred Martin (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 相津新, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸, 小林亮
2. 発表標題 高Li拡散性かつ高変形能を有する塩化物材料のシミュレーション探索と実験的評価
3. 学会等名 日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 武田はやみ, 谷端直人, 中山将伸, 久世智, 田中秀央, 島野哲
2. 発表標題 酸化物固体電解質圧粉体の導電率特性
3. 学会等名 第61回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岩崎梨音, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 第一原理計算による金属Liとガーネット型固体電解質材料の固固界面評価
3. 学会等名 第61回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 福田紘子, 草川隼也, 中野高毅, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸, 烏山昌幸, 竹内一郎, 名取孝章, 大野康晴
2. 発表標題 実験とバイズ最適化を併用したLi過剰NASICON型固体電解質の最適組成探索
3. 学会等名 第61回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 谷端直人, 松ノ下広騎, 竹内寛和, 赤塚涼乃, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 全固体Na電池のための超Naイオン伝導体Na <sub>10</sub> Sn <sub>4</sub> の評価
3. 学会等名 第48回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 谷端直人, 近藤冴香, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 アモルファス化によるアニオンレドックスの高速化と高容量ナトリウムイオン電池
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Chiyori Komori, Yuki Mori, Shinichiro Yano, Magnus So and Gen Inoue
2. 発表標題 Stress and Electrochemical Reaction Prediction of the Particle Structure of All-Solid-State Batteries By Numerical Simulation and Machine Learning
3. 学会等名 242nd ECS meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Magnus So, Shinichiro Yano, Agnesia Permatasari, Thi Dung Pham, Gen Inoue
2. 発表標題 Simulation of intercalation induced expansion and fragmentation in all-solid state battery anodes
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 井上 元, 矢野 振一郎, 宗 マグヌス
2. 発表標題 全固体電池のDEMによる応力分布解析とネットワークモデルによる輸送解析の連成
3. 学会等名 第63回電池討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 全固体電池電極の数値シミュレーション
3. 学会等名 大阪公立大学全固体電池実用化研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 武藤俊介, 駒井心一, 大塚真弘
2. 発表標題 STEM-EELS吸収端広域微細構造のスパースモデリングによるD-W因子マッピング
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第78回学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 Nexialismと計測インフォマティクス-異分野を繋ぐ橋
3. 学会等名 第7回IMaSS交流会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 蓄電池がもたらすグリーン社会
3. 学会等名 応用物理学会 第155回 結晶工学分科会研究会 カーボンニュートラルに結晶工学が果たす役割- 地球温暖化問題の現状と解決に向けた最前線（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Microscopic Electrochemistry of Ion Transport at Heterogeneous Solid-Solid Interface in Li-Ion Battery
3. 学会等名 IUMRS-ICA2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT study on interfaces in solid state battery via direct interface models
3. 学会等名 3rd WORLD CONFERENCE ON SOLID ELECTROLYTES FOR ADVANCED APPLICATIONS: GARNETS AND COMPETITORS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Ion and Electron Transfer at Interfaces in Solid-state Batteries Via First-principles Calculations
3. 学会等名 International Battery Association 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 電解質界面・電解質探索に関する計算・データ科学研究動向
3. 学会等名 日本化学会 第15回技術開発フォーラム：全固体電池の最新動向 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT approaches to electron and ion transfer in battery & DFT-based studies on battery issues
3. 学会等名 EU-Japan workshop on HPC-based material sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 「富岳」電池課題概要 & 全固体電池の材料課題解決への取組み
3. 学会等名 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会プログラム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 First-principles MD simulations of reduction/oxidation reactions in electrolyte solutions
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 「京」・「富岳」を用いた蓄電池内現象の見える化
3. 学会等名 「第5回元素戦略シンポジウム」革新的マテリアルでカーボンニュートラルな社会を構築 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 理論計算による全固体電池の電子・イオン移動の可視化
3. 学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学会 第112回例会 公開講演会「電池材料と計算化学」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 「富岳」「京」を用いた蓄電池内現象の可視化
3. 学会等名 第50回産協セミナー 計算科学の発展と展望:京・富岳の活用事例を通して(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 全固体電池材料のイオン輸送機構に関する計算予測
3. 学会等名 「富岳」電池課題 第2回公開シンポジウム(成果報告会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 館山佳尚
2. 発表標題 次世代EV開発に向けたバッテリーマテリアル研究on「富岳」
3. 学会等名 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム富岳百景 公開シンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 DFT-Based Computational Design Of Inverse Ruddlesden-Popper-Type Solid Electrolytes For All-Solid-State Lithium Ion Battery Application
3. 学会等名 IUMRS-ICA2021 ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Bo Gao
2. 発表標題 Surface-Dependent Stability of Interface between Garnet $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ and Li Metal in the All-Solid-State Battery: A First-Principles Study
3. 学会等名 3rd WORLD CONFERENCE ON SOLID ELECTROLYTES FOR ADVANCED APPLICATIONS: GARNETS AND COMPETITORS ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Randy Jalem
2. 発表標題 Computational Exploration of Inverse Ruddlesden-Popper-Type Solid Electrolytes for All-Solid-State Lithium Ion Batteries by First-Principles DFT Calculations
3. 学会等名 3rd WORLD CONFERENCE ON SOLID ELECTROLYTES FOR ADVANCED APPLICATIONS: GARNETS AND COMPETITORS ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 ハレム ランディ、館山佳尚、高田和典、中山将伸
2. 発表標題 First-Principles DFT-based Computational Design of Novel Solid Electrolytes with Inverse Ruddlesden-Popper Tetragonal Structure for All-Solid-State Batteries
3. 学会等名 第62回電池討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Revealing the Microscopic Electrochemistry at the Cathode/Coating/Solid Electrolyte Interfaces via the First-Principles Structure Prediction Scheme
3. 学会等名 第62回電池討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐々木遼馬、守谷誠、渡邊佑紀、西尾和記、一杉太郎、館山佳尚
2. 発表標題 分子動力学法による $\text{Li}_x\text{N}(\text{SO}_2\text{F})_2(\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CN})_2$ 有機結晶電解質の高速リチウムイオン伝導機構の解明
3. 学会等名 第62回電池討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Exploration of Li-Rich Inorganic Compounds with Inverse Ruddlesden-Popper-Type Structure by First-Principles DFT Calculations for Solid Electrolyte Application in All-Solid-State Batteries
3. 学会等名 2021 MRS Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Randy Jalem
2. 発表標題 Combining density functional theory approaches and Bayesian optimization for the large-scale efficient search of novel all-solid-state battery electrolytes
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 全固体電池材料探索のための材料インフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会関西支部 2021 年度支部セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 NASICON型Liイオン導電性酸化物の安定性、イオン伝導、界面イオン交換
3. 学会等名 第182回電子セラミック・プロセス研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 Liイオン導電性 NASICON型材料の固固界面構造と材料計算
3. 学会等名 第1回計算イオニクス研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷端直人、加藤雅士、瀧本秀太、中野高毅、武田はやみ、中山将伸、鷺見 裕史
2. 発表標題 高変形能を有するLi <sub>2</sub> FeCl <sub>4</sub> のメカノケミカル合成とリチウムイオン伝導性評価
3. 学会等名 2021年電気化学秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福田紘子、中野高毅、谷端直人、武田はやみ、中山将伸、大野康晴
2. 発表標題 実験とバイズ最適化を併用したNASICON型固体電解質の最適組成探索
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤 諒、宮路 康裕、中野 弘毅、谷端 直人、武田 はやみ、中山 将伸、小林 亮
2. 発表標題 ハイスルーブットカ場を用いた新規Li-S系固体電解質材料の探索
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 機械学習の最前線:電気化学デバイス材料微構造設計のための機械学習
3. 学会等名 2021 年度 SOFC 研究会総会 及び第 119 回 SOFC 研究会 (Web 講演会) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 実電極層内特性評価と構造設計のための計算技術開発
3. 学会等名 日本化学会第101回春季年会(2021)(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 Evaluation and optimization of heterogeneous electrode structure in secondary batteries and fuel cells by numerical analysis and direct observation
3. 学会等名 第2回SNU-KYUSHU JOINT SYMPOSIUM (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 数値シミュレーションによる全固体電池電極の動的構造変形と電池特性解析
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小森 千有里, 石川 翔太, 布下 敬太, 宗 マグナス, 木村 直樹, 井上 元, 柘植 義文
2. 発表標題 数値シミュレーションと機械学習による粒子構造の応力推算
3. 学会等名 化学工学会第52回秋季大会電池シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 リチウム電池、燃料電池の電極設計のためのシミュレーション技術
3. 学会等名 2021年度第31回高分子学会東海支部東海ミニシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 計算技術によるリチウムイオン電池電極層の特性評価と構造設計
3. 学会等名 神奈川大学新型電池オープンラボ講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 DAM Hieu-Chi
2. 発表標題 材料データから材料の物性を理解するための証拠へ
3. 学会等名 日本化学会 第102春季大会（2022）・イノベーション共創プログラム（CIP）・マテリアルズ・インフォマティクスの表面・界面系への拡張（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 DAM Hieu-Chi
2. 発表標題 Learning similarities between materials from data
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 DAO Duc-Anh, Vu Tien-Sinh, Nguyen Duong-Nguyen, Keisuke Ishizuka, Yoshifumi Oshima, Masahiko Tomitori, DAM Hieu-Chi
2. 発表標題 Elucidating atomic-scale phenomena with transmission electron microscopy: a study of gold nanocontact
3. 学会等名 2021 IUPAP Conference on Computational Physics（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 VU Tien-Sinh, DAM Hieu-Chi
2. 発表標題 Deep attention model for extracting material structure-property relationships
3. 学会等名 2021 IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 HA Minh-Quyet, DAM Hieu-Chi
2. 発表標題 Application of evidence theory to recommend solvent mixtures for chemical exfoliation of graphite
3. 学会等名 2021 IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Shiga, S. Muto
2. 発表標題 Statistical Machine Learning approaches for Noisy Spectral Imaging Data
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 計測インフォマティクスの誘惑とその功罪・私的展望
3. 学会等名 CREST-さきがけ複合領域「情報計測」令和3年度 材料分野における情報計測クラスタ会議(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 喜多條鮎子, 山下真歩, 岡田昌樹, 小林渉, 武藤俊介
2. 発表標題 炭酸ナトリウム過剰添加によって合成したNaTi <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> 負極の水系Naイオン電池特性
3. 学会等名 第62回電池討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介, 大塚真弘
2. 発表標題 高エネルギー電子プローブを用いたナノ物性計測法の開発と磁性材料への応用
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期第169回講演大会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介, 梅本大樹, 荒井重勇, 菊間淳, 乙部博英
2. 発表標題 ポリマーブレンドのナノスケール化学イメージング
3. 学会等名 第70回高分子討論会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀, 武藤俊介
2. 発表標題 分光スペクトル解析のための統計的機械学習
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第77回学術講演会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介, 山本悠太, 館山佳尚, 入山恭寿
2. 発表標題 全固LIB電解質 / 正極界面相のSTEM-EELS ハイパースペクトラムイメージ解析
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第77回学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 駒井心一, 武藤俊介, 大塚真弘
2. 発表標題 スパースモデリングによるEXELFS解析
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第77回学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 蓄電池材料インフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会 2021年年会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 第一原理計算を用いた無秩序岩塩型酸化物における固体内酸素レドックス反応解析
3. 学会等名 日本化学会第101回春季年会 併催シンポジウム 新学術領域研究「蓄電固体界面科学」成果報告会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 全固体電池におけるLATP/LCO界面で何が起きているか-断面STEM-EELS解析でここまでわかる-
3. 学会等名 日本化学会第101回春季年会 併催シンポジウム 新学術領域研究「蓄電固体界面科学」成果報告会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT calculation study on Li metal / LLZO electrolyte interfaces: stability and ion transport
3. 学会等名 Interface IONICS online symposium 2021 Spring (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT-based understanding of ion transfer at heterogeneous solid-solid interfaces in batteries
3. 学会等名 CECAM/Psi-k Flagship Workshop "Materials Design for Energy Storage and Conversion: Theory and Experiment" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Analysis and optimization for Li conductive NASICON-type LiZr <sub>2</sub> (PO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> solid electrolytes
3. 学会等名 45th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 材料インフォマティクスを活用した蓄電池材料の効率的な最適化と発見
3. 学会等名 CAE POWER 2020 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Introduction: Materials informatics for a low-carbon society
3. 学会等名 e-ASIA Joint Research Program Online Workshop on Materials Informatics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT Sampling Studies on Interface Ionics at Heterogeneous Solid-Solid Interfaces in Batteries
3. 学会等名 ENGE 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Theoretical Analysis of Microscopic Interface Ionics at Heterogeneous Solid-Solid Interfaces in Batteries
3. 学会等名 PRIME 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 反応科学超高压走査透過電子顕微鏡の最前線
3. 学会等名 学振ナノブローテクノロジー第167委員会 第94回研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 蓄電固体界面の材料シミュレーションとインフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第33回秋季シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岩崎 梨音、石田 国大、谷端 直人、武田 はやみ、中山 将伸
2. 発表標題 第一原理計算による金属 Li とガーネット型固体電解質材料の固固界面評価
3. 学会等名 日本セラミックス協会2021年年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷端直人、瀧本秀太、中野高毅、武田はやみ、中山将伸、鷲見 裕史
2. 発表標題 高成形性を有するLiAlCl <sub>4</sub> 固体電解質のメカノケミカル合成と電気化学的評価
3. 学会等名 日本セラミックス協会2021年年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Zijian Yang, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Using Bayesian Optimization to Accelerate the Screening of Perovskite-type Solid Electrolyte for All-Solid-State Li-ion Batteries
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 瀧本秀太, 中野高毅, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 全固体リチウム金属電池用電解質LiAlCl <sub>4</sub> のメカノケミカル合成と電気化学特性
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石田国大, 近藤諒, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 第一原理計算による全固体リチウムイオン電池における正極-固体電解質界面の構造解析
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Yusuke Noda, Ryo Kobayashi, and Ichiro Takeuchi
2. 発表標題 Highly efficient composition optimization of high Li-ion conductors using material simulation and Bayesian optimization
3. 学会等名 6th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment (ENGE 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shuta Takimoto, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Preparation of Metastable Chloride Solid Electrolyte with High Formability for All-Solid-State Lithium Metal Batteries
3. 学会等名 6th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment (ENGE 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Risa Yasuda, Taruto Atsumi, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Structure Classification for Li Containing Oxides by Machine Learning
3. 学会等名 6th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment (ENGE 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井上 元・宗 マグヌス・平手 隆晴・柘植 義文
2. 発表標題 電極層内の粒子分散状態が全固体電池特性に及ぼす影響
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会 (2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 布下 敬太・平手 隆晴・木村 直樹・井上 元・柘植 義文
2. 発表標題 外部応力と体積変化を考慮した全固体電池の電池特性シミュレーション
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会 (2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石川 翔太・宋 マグヌス・木村 直樹・井上 元・柘植 義文
2. 発表標題 計算、観察、機械学習による多孔質電極構造特性の推定
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会 (2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Keita Nunoshita, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge, Naoki Kimura
2. 発表標題 Evaluation of effect of volume expansion on cell performance of all-solid-state batteries with 1D simulation
3. 学会等名 2020年 電気化学秋季大会 (PRiME2020: 第8回日米合同大会) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shota Ishikawa, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge, Naoki Kimura
2. 発表標題 Simulation of Correlation Estimation of Porous Structure Properties of Secondary Battery Using Machine Learning
3. 学会等名 2020年 電気化学秋季大会 (PRiME2020: 第8回日米合同大会) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Magnus So, Ryusei Hirate, Keita Nunoshita, Shota Ishikawa, and Yoshifumi Tsuge
2. 発表標題 Modelling Intercalation Induced Stresses in All Solid-State Batteries Using Discrete Element Method
3. 学会等名 2020年 電気化学秋季大会 (PRiME2020: 第8回日米合同大会) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 機械学習の最前線：電気化学デバイス材料微構造設計のための機械学習
3. 学会等名 2021 年度 SOFC 研究会総会 及び第 119 回 SOFC 研究会 (Web 講演会) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 実電極層内特性評価と構造設計のための計算技術開発
3. 学会等名 日本化学会第101回春季年会 (2021) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 実験データ解析に機械学習は本当に有効か？
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第76回学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 武藤俊介
2. 発表標題 名古屋大学反応科学超高圧走査透過電子顕微鏡の新展開
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第76回学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大塚真弘, 織田健嗣, 田中誠, 北岡諭, 武藤俊介
2. 発表標題 ビームロッキング分析によるドーバント周りの局所格子歪みと酸素欠損サイトの評価
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第76回学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 ヘテロ固固界面構造探索手法の開発と全固体電池界面への適用
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第33回秋季シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Toshihiko Mandai, Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Inevitable Critical Issues of Fluorinated Alkoxyborate-based Electrolytes in Magnesium Battery Applications
3. 学会等名 PRiME 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Bo Gao, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Electron and ion modulation at the NASICON solid-electrolyte/electrode interfaces at static and operating conditions in all-solid-state batteries: A DFT study
3. 学会等名 PRiME 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yong Youn, Azusa Kamiyama, Kei Kubota, Shinichi Komaba, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 A Theoretical Study for Revealing the Mechanism of Sodiation in Hard Carbon for High Capacity Anode
3. 学会等名 ENGE 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 カーネット型Li7La3Zr2012/Li金属負極界面の安定性・酸化還元に関する第一原理計算研究
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 館山佳尚、袖山慶太郎
2. 発表標題 炭酸リチウムSEI / グラファイト負極界面におけるLiイオン輸送の第一原理計算解析
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐々木 遼馬、守谷 誠、渡邊 佑紀、西尾 和記、一杉 太郎、館山 佳尚
2. 発表標題 スクシニトリル系分子結晶電解質の高速リチウムイオン伝導機構の分子動力学解析
3. 学会等名 電気化学会第88回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 トウルソン フィロラ, 山本 健太郎, 万代 俊彦, 館山 佳尚, 中西 康次, 内山 智貴, 渡邊 稔樹, 金村 聖志, 内本 喜晴
2. 発表標題 Mg(B(HFIP)4)2系電解質におけるMg金属析出反応機構の解明
3. 学会等名 第61回電池討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shunsuke Muto, Taiki Yamada, Masahiro Ohtsuka, Haruhiko Yoshino, Shin-ichi Amma and Yoshimasa Takahashi
2. 発表標題 Local stress distribution in phase-separated glass by scanning transmission electron microscopy-cathodoluminescence
3. 学会等名 12th Asia-Pacific Microscopy Conference, APMC-2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 エネルギー物質科学と界面イオニクス・エレクトロニクス
3. 学会等名 第58回 玉城嘉十郎教授記念公開学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 第一原理酸化還元反応シミュレーション
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 全固体電池とマテリアルズ・インフォマティクス
3. 学会等名 耐火物技術協会東海支部, 2019年度見学講習会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 computational and theoretical electrochemistry of Li-ion states around electrode / solid electrolyte interfaces
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources 2019 (ACEPS-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 マテリアルズ・インフォマティクスによる蓄電池材料の探索
3. 学会等名 日本ファインセラミックス協会, JFCAセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT Sampling Studies on Interface Ionics at Disordered Heterogeneous Solid-Solid Interfaces
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Asian-22) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto
2. 発表標題 Single pass STEM-EMCD for quantitative magnetic moment measurement
3. 学会等名 Beijing Conference and Exhibition on Instrumental Analysis (BCEIA 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto
2. 発表標題 Machine learning techniques for electron microscopic/spectroscopic image data analysis
3. 学会等名 12th International Symposium on Atomic Level Characterization for New Materials and Devices '19, ALC '19 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto
2. 発表標題 High-voltage scanning/transmission electron microscopy at Nagoya Where do we come from? What are we? Where are we going?
3. 学会等名 International Conference on Analytical Science and Technology, ICAST 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT studies on ionic and electronic states around electrode/solid-electrolyte interfaces via efficient structure search techniques
3. 学会等名 2nd World Conference on Solid Electrolytes for Advanced Applications: Garnets and Competitor (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Data-Driven Materials Exploration of Ion Conductive Ceramics for All Solid-State Rechargeable Batteries with Materials Simulation
3. 学会等名 2nd World Conference on Solid Electrolytes for Advanced Applications: Garnets and Competitors (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto, and Masahiro Ohtsuka
2. 発表標題 Quantitative element/site-selective chemical analysis of crystalline materials using a beam-rocking method
3. 学会等名 Frontiers of Electron Microscopy on Materials Science, FEMMS 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto, Jakob Spiegelberg, Motoki Shiga, Masahiro Ohtsuka and Jan Rusz
2. 発表標題 Mining Physical/Chemical Properties from Nano-Scale Areas Using STEM Spectroscopic Methods and Informatics Techniques
3. 学会等名 The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, PRICM10 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 DFT sampling approach to interface and surface processes in catalyst and battery
3. 学会等名 CPMD Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 館山 佳尚
2. 発表標題 第一原理計算からみた蓄電池界面のイオン・電子状態
3. 学会等名 第74回 固体イオニクス研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 谷端直人・森本陸・西川慶・武田はやみ・中山将伸
2. 発表標題 Laplace変換インピーダンス法を用いたリチウム金属電極における非対称な充放電抵抗の解析
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 谷端直人・加藤雅士・中野高毅・武田はやみ・中山将伸
2. 発表標題 メカノケミカル法によるLi <sub>2</sub> FeCl <sub>4</sub> の合成とリチウムイオン伝導性評価
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田真帆, 武田はやみ, 中野高毅, 谷端直人, 中山将伸
2. 発表標題 Li過剰NASICON型固体電解質のLiイオン伝導性評価及び高伝導性組成探索
3. 学会等名 第60回電池討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田真帆, 武田はやみ, 中野高毅, 谷端直人, 中山将伸
2. 発表標題 ベイズ最適化によるLi過剰NASICON型酸化物系固体電解質の高伝導性組成探索
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 李 海仁, 中野高毅, 谷端 直人, 武田はやみ, 中山将伸
2. 発表標題 ハイスループット計算と機械学習によるナトリウム電池材料の探索
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 前田将基, 谷端直人, 中山将伸, 藪内直明
2. 発表標題 第一原理計算によるLi過剰系酸フッ化物正極材料のレドックス機構解析
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中野高毅, 谷端直人, 武田はやみ, 中山将伸, 野田祐輔, 小林亮, 竹内一郎
2. 発表標題 材料シミュレーションとベイズ最適化を用いた高Liイオン伝導体の高効率組成最適化
3. 学会等名 電気化学会第87回大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Nakano, Y. Noda, N. Tanibata, M. Nakayama, K. Kajihara, K. Kanamura
2. 発表標題 “ Evaluation of the Mg-ion conductivity and phase stability of Mg-ion conductor MgZr <sub>4</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>6</sub> by DFT method ”
3. 学会等名 The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies, ( 国際学会 )
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sayaka Kondo, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Naoaki Yabuchi
2. 発表標題 Charge reaction mechanisms of rocksalt-type Li <sub>1.2</sub> Mn <sub>0.4</sub> Ti <sub>0.4</sub> O <sub>2</sub> cathode oxides using first principals calculations
3. 学会等名 The 13th Pacific Rim Conference of Ceramics Societies ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井上 元
2. 発表標題 リチウムイオン電池・燃料電池の数値解析とモデリング ( 化学工学的アプローチ )
3. 学会等名 電気化学会関東支部 第 55 回学際領域セミナー 電気化学デバイスの実用化に向けた学際的アプローチ ( 招待講演 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryusei Hirate, Hiroki Mashioka, Shinichiro Yano, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge
2. 発表標題 Simulation for all-solid state batteries with multi-element network model
3. 学会等名 18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress, APCCHE 2019 ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Gen Inoue, Hiroki Mashioka, Yoshifumi Tsuge
2. 発表標題 Evaluation of porous structure on dynamic behavior in Lithium-ion batteries by numerical simulation
3. 学会等名 18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress, APCCHE 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Gen Inoue
2. 発表標題 Integrated simulation approach to understand the relationship between fabrication process and cell performance in polymer electrolyte fuel cells
3. 学会等名 The Fifth International Symposium on Innovative Materials and Processes in Energy Systems, IMPRES2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Mashioka, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge
2. 発表標題 Identifying parameters from discharging and relaxation curves of Lithium-ion batteries using porous electrode theory
3. 学会等名 The Fifth International Symposium on Innovative Materials and Processes in Energy Systems, IMPRES2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Yamamoto, Y. Iriyama, S. Muto
2. 発表標題 Interface of electrode-solid electrolyte composite of ASS-LIB fabricated by aerosol deposition analysed by STEM- EELS
3. 学会等名 International Conference on Materials and Systems for Sustainability (ICMaSS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山本 悠太, 入山 恭寿, 武藤 俊介
2. 発表標題 固体酸化物電解質表面とAD法で作製した複合電極界面のSTEM-EELS分析
3. 学会等名 日本顕微鏡学会第75回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shunsuke Muto
2. 発表標題 Recent progress in quantitative STEM-energy loss magnetic chiral dichroism measurement,
3. 学会等名 Beijing Conference and Exhibition on Instrumental Analysis (BCEIA 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, Yoshitaka Tateyama
2. 発表標題 Structure Search and Property Analysis of Interfaces between Cathode and Solid Electrolyte in All-Solid-State Battery via DFT-CALYPSO Method
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Electrochemical Power Sources 2019, The organizing committee of ACEPS-10 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama,
2. 発表標題 Atomic-scale insight into surface morphology and stability of interface between garnet $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ and Li metal from first principles
3. 学会等名 2nd World Conference on Solid Electrolytes for Advanced Applications: Garnets and Competitors (Garnet2019), Organizing Committee of Garnet 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ashu Choudhary, Keitaro Sodeyama, Yoshitaka Tateyama,
2. 発表標題 Effects of Magnesium-Organohalogen complex in Magnesium Ion Battery electrolytes: A Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) Study
3. 学会等名 CPMD Meeting 2019 - Pushing the Boundaries of Molecular Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, Yoshitaka Tateyama,
2. 発表標題 Structure Search and Property Analysis of Interfaces between Cathode and Solid Electrolyte in All-Solid-State Battery via DFT-CALYPSO Method
3. 学会等名 The eleventh International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-11) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>NIMS GREEN 界面計算科学グループ→東京工業大学館山研究室ホームページ  <a href="https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp">https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp</a>  名古屋工業大学中山研究室ホームページ  <a href="http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/">http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/</a>  九州大学井上研究室ホームページ  <a href="https://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/">https://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/</a>  北陸先端科学技術大学院大学ダム研究室ホームページ  <a href="http://www.jaist.ac.jp/~dam/">http://www.jaist.ac.jp/~dam/</a>  名古屋大学武藤研究室実験紹介  <a href="https://www.jove.com/v/62015">https://www.jove.com/v/62015</a></p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	中山 将伸  (Nakayama Masanobu)  (10401530)	名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・教授    (13903)	

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	武藤 俊介  (Shunsuke Muto)  (20209985)	名古屋大学・未来材料・システム研究所・教授    (13901)	
研究分担者	井上 元  (Gen Inoue)  (40336003)	九州大学・工学研究院・教授    (17102)	
研究分担者	D A M H i e u C h i  (Dam HeiuChi)  (70397230)	北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授    (13302)	

## 7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 Interface IONICS International Online Symposium 2022	開催年 2022年～2022年
--	--------------------

## 8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関