

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：82626

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K15177

研究課題名（和文）データ駆動型表面科学研究の基盤構築に向けた第一原理計算手法の高精度化と実材料展開

研究課題名（英文）Development of high-accurate first-principle calculation methods for surface science and the application to material science: Building the foundation for the data-driven surface science

研究代表者

多田 幸平（Tada, Kohei）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エネルギー・環境領域・主任研究員

研究者番号：70805621

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、機能性開殻分子の電子状態やスタック構造が表面との相互作用でどのように変化するかを解き明かし、新規な分子デバイスのデータ・計算駆動型研究につなげるため、開殻分子の特徴的な電子状態であるジラジカル状態を表面吸着構造において検討できるための理論基盤の構築を目的とした。初年度において、ジラジカル状態の理論計算で生じる誤差の補正法、及び、特徴量であるジラジカル性を解析する方法を確立した。2年目～3年目においては、開発手法の論文化と様々な材料系への応用を行った。具体的には、開発手法に関する総括論文の執筆を行うとともに、触媒・蓄電池材料を中心とした応用成果を論文として発表するに至った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ジラジカル状態の解析は、機能性開殻分子の物性や化学反応性を理解する上で重要であり、その特徴量であるジラジカル性は、開殻分子の機能解明や設計において重要なファクターである。近年、機能性開殻分子を表面に固定化し、分子デバイスの創生がチャレンジされているが、表面相互作用がジラジカル状態に与える影響については、未だ不明な点が多い。分子デバイスは、分子一つ一つがデバイスとしての機能を発現する究極の微小化デバイスであり、SDGsの達成のために世界各国で研究が行われている。本申請課題で達成した、積層分子のジラジカル状態に対する高精度計算・高度解析技術は、この分子デバイス開発を大きく加速させるものである。

研究成果の概要（英文）：The aim of this research project is to establish a theoretical basis for investigating the diradical state, which is a feature electronic state of open-shell molecules, in surface-adsorbed structures in order to elucidate how the electronic state and stack structure of the functional open-shell molecules are affected by the interaction with surfaces, leading to data- and computation-driven studies of novel molecular devices. In the first year (2020), I established a method for correcting errors in theoretical calculations of diradical states and a method for analysing diradical character which is known as a feature value of diradical state. In the following years (2021, and 2022), the developed methods were applied to various material systems, and the results and discussions were published as the papers. Specifically, review articles on the developed methods were written, and the application results, mainly to catalyst and battery materials, were published.

研究分野：物理化学

キーワード：ジラジカル分子 密度汎関数理論 スピン混入誤差 ジラジカル性 分子-表面相互作用 不均一系触媒
新奇二次電池材料 分子デバイス

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、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

持続可能な開発目標 (SDGs) において、目標 7 (エネルギー) や目標 11 (イノベーション)、目標 12 (生産・消費) 等の達成に向けて様々な機能性分子が創成されている。例えば、炭素循環型社会や水素社会といったクリーンなエネルギー社会を実現していくためには触媒技術は欠かせないものであるし、その触媒は金属原子一つ一つが機能をもつ単原子分散型触媒や一切の金属原子を用いない有機分子触媒であることが資源 (消費) の面から望まれる。他にも、分子そのものを回路の素子として用いる試み (分子素子) は、電子回路の飛躍的な小型化につながる大きなイノベーションとなるだろう。しかし、これらをバルク状態で使用すると、その機能を有効に活用できていない分子を内部に生むことになる。また、分子素子などは安定な基盤上に配列させたうえでその機能を解析していく必要がある。つまり、機能性分子やそれらによる機能性薄膜を安定な担体 (基盤) 上に成長・自己組織化させ、可能な限り少ない資源量で可能な限り環境負荷の少ない機能性薄膜・表面を構築していくことが SDGs の達成に大きな役割を果たすと考えられる。

表面吸着分子の詳細な解析において、走査型トンネル顕微鏡 (STM) は極めて有効なツールである。だが、高解像度な STM 測定には長時間の安定した極低温が要求されるため、省資源かつ大量なデータを得ることは出来ない。そして、原子間力顕微鏡 (AFM) や種々の表面分光法と高解像度 STM の測定を同一条件で行いデータとして蓄積することは容易ではない。つまり、SDGs 達成のための機能性薄膜・表面材料を SDGs の方針に矛盾しないデータ駆動型で遂行するためには、実験的なアプローチだけに限ってはいは極めて困難である。

その相補的解析手法の有力候補として、密度汎関数理論 (DFT) に基づく理論計算が挙げられる。DFT 計算は電子状態を詳細に解析する第一原理的手法の一つであり、未知材料に対する様々な物性も計算することが可能である。そして、それらを系統的なデータとして蓄積できるため、データ駆動型研究との相性もいい。だが、表面の DFT 計算は実用上使う必要のある局所密度近似 (LDA) や一般化勾配近似 (GGA) 等に由来する多くの計算誤差 (静的・動的電子相関、スピン混入など) を容認せざるを得ない。特に、遷移金属化合物においてしばしば出現する局在スピンの由来する誤差 (スピン混入誤差) は補正法すら確立されていなかった。

2. 研究の目的

もし、誤差が許容できないほど大きければ、メカニズムの解明や材料の選定を見誤ってしまうだけでなく、DFT 計算結果から構築されていく表面科学データベースの信頼性は著しく低下する。そのため本研究では、分子-表面吸着系における誤差 (特にスピン混入誤差) を算出する手法を確立し、AFM や STM の測定例のある実際の機能性薄膜に適用することで、実験との比較検討を通じた計算精度の検証・担保によって、データ駆動型表面科学研究の礎を構築していくことを研究目的とした。

3. 研究の方法

本研究の目的達成で重要となるのが、現状手法では高次元系の計算が不可能であることの原因解明とその解決である。申請の段階で既に知見を得ており、スピン局在系の DFT 計算の過程でスピン射影 (AP 法) によって求める全スピン演算子の二乗の期待値 (S^2) がモデルサイズに依らない事 (Size consistency) の回復が課題となることを突き止めていた。そこでまず、第一課題として、Size consistency の回復を初年度に取り組んだ。

2 年目では既に申請者が検討を行っている材料系を中心に開発手法の応用研究を展開する。現状ではスピンが局在していない系や単分子吸着に限定して検討を行っていたが、1 年目での理論開発によってその制限は無くなる。STM/AFM 測定結果との比較検討も行き、自己組織化機構における誤差を定量的に算出し、機構の解明を目指す。

3 年目では、2 年目で培った知見と技術を用いて次世代材料のシミュレーションに着手する。一連の技術開発と実在系への応用を礎として、機械学習や AI との連携によるデータ駆動型表面科学研究へ展開を提示することで、本研究の目的を達成する。

4. 研究成果

(1) 多次元系のスピン混入誤差の算出

開殻系の密度汎関数理論計算 (DFT 計算) に含まれる誤差 (スピン混入誤差) の影響を系の次元によらず検討する方法を初年度に確立した。これは、当初の計画通りである。開発手法を、表面で孤立した原子、1 次元に組織化した原子、2 次元に組織化した原子に対して適応することで、表面自己組織化における計算誤差の影響の変化を系統的に解明した。さらには、二次電池材料へ適用することで誤差の影響を最小限に抑えつつ検討を行える条件に関して検討を加え、明らかにした。

(2) 電荷密度に基づくジラジカル性算出法の開発

手法開発の段階において、開殻系の特徴量であるジラジカル性を、固体の一般的な電子状態計算手法 (DFT/plane-wave 計算) の結果から簡便に算出するスキームを見出した。当初計画には

なかったが、当該手法の開発は、機能性開殻分子の各種機能と相関を示すジラジカル性を、ハイスループットな第一原理計算法 (DFT/plane-wave 法) の結果から直ちに算出する画期的なものであった。高精度計算や実験値との比較を通して、DFT/plane-wave 計算結果から高精度にジラジカル性を算出できる技術であることを示した。さらには、開殻分子を検討するために必要となる、種々の化学指標 (有効結合次数、共有結合エントロピー、対称性が破れた軌道の占有数) に関しても同様に DFT/plane-wave 計算結果から簡便に算出するスキームを確立した (図 1)。確立したスキームは、表面反応の解析や表面ジラジカル状態の解析に対して極めて有効である。例として、表面での NO 二量化反応における遷移状態の安定性の違いをジラジカル性の解析から明らかにした (図 2)。

(3) スピネル型チタン酸化物の多機能性の検証

蓄電池の電極材料は、複数の元素・価数からなる遷移金属化合物である。このような化合物は、電極のみならず様々な機能を発現することが予想されるが、実験的に検証していくことは難しい。他方、ジラジカル状態は、遷移金属化合物のような開殻電子をもつ物質の機能を理解するうえで重要であると考えられ、特に、特徴量であるジラジカル性に関しては、導電性や磁性、非線形光学特性、触媒活性との相関や関係式が確認されていた。本研究では、開発した新たなジラジカル解析技術を用い、Li-ion 蓄電池の負極材料であるスピネル型チタン酸化合物の多機能性を検証した。その結果、Li Na の置換で触媒活性が向上すること、Cu や Ag により光学的な特性が変化することを解明した (図 3)。なお、当該論文で存在を予言したスピネル型チタン酸銀は後に実験協力者によって合成が達成され、高精度バンド計算による予言が正しいことが証明された。

(4) 次世代エネルギー・環境材料への展開

実験研究者と協力しながら、次世代材料への技術応用を行った。電極触媒、Na-ion 蓄電池、K-ion 蓄電池、コンバージョン型蓄電池、新規フッ化物、安定有機ピラジカルなど、応用例は非常に多岐にわたる。図 4 は、K-ion 電池材料を元にした新規八ニカム複合酸化物の高精度計算結果による予言であるが、このうち Ag 化合物は実験協力者によって後に合成された。その Ag 化合物は超イオン伝導転移を起こすことが確認され、また、Kitaev 量子スピン液体の材料としても期待される。

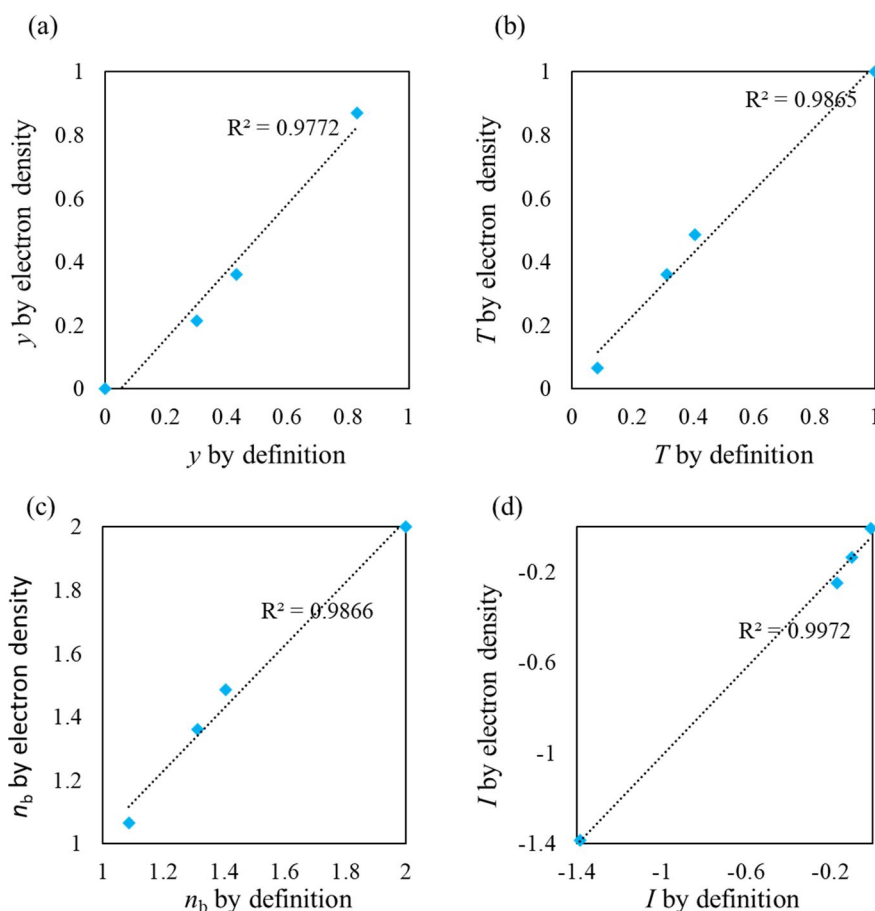


図 1 ジラジカル性 (y)、有効結合次数 (T)、結合性フロンティア軌道の占有数 (n_b)、結合エントロピー (I) の開発手法による算出値 (縦軸) と従来定義に基づく算出値 (横軸)。引用文献より許可を得て図を引用。

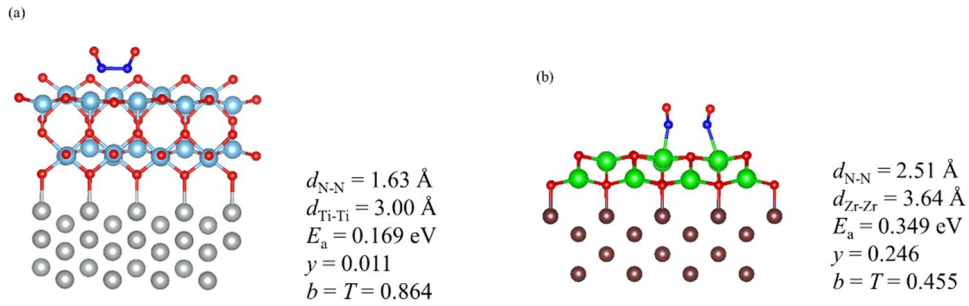


図2 NO二量触媒の遷移状態における化学指標の違い。左図が活性化エネルギーの低い触媒、右図が活性化エネルギーの高い触媒。活性化エネルギーが低い触媒では、ジラジカル性 (y) が小さくなる。引用文献 より許可を得て図を引用。

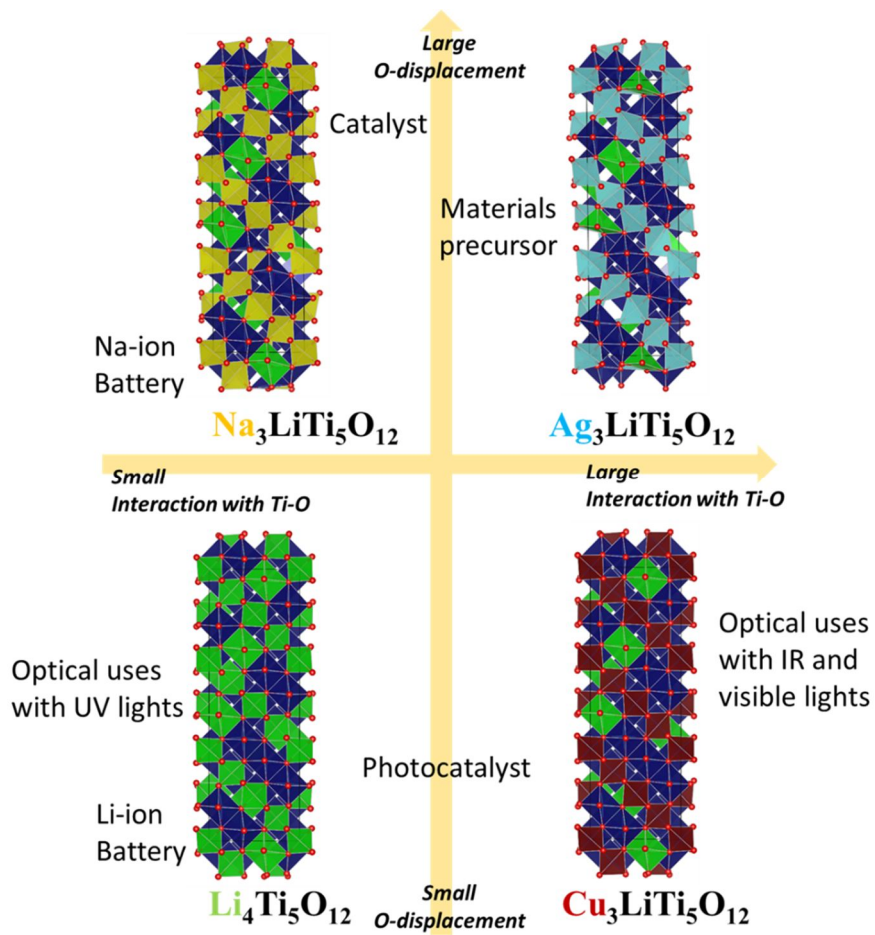


図3 高精度バンド計算から得た、スピネル型チタン酸化物の特性と、応用が期待される材料機能。引用文献 より許可を得て図を掲載。

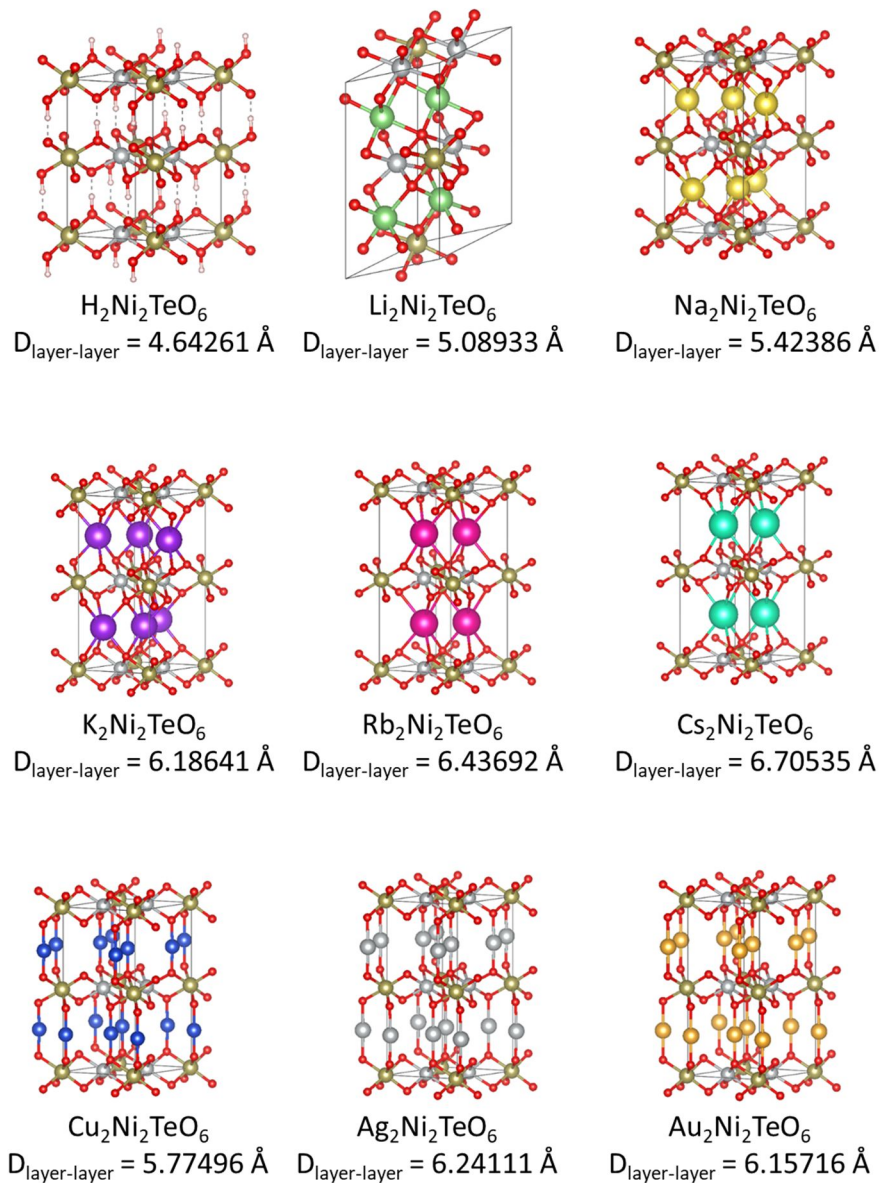


図4 $\text{M}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ ($\text{M} = \text{H}, \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{Cu}, \text{Ag}, \text{and Au}$)の構造予測。

引用文献

Kohei Tada, Hiroyuki Ozaki, Koji Fujimaru, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura, Can we enhance diradical character using interaction with stoichiometric surfaces of ionic oxides? A theoretical investigation using chemical indices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, volume 23, 2021, 25024-25028.

Kohei Tada, Mitsunori Kitta, Shingo Tanaka, Properties of spinel-type Ti-Li-M composite oxides ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{Cu}, \text{and Ag}$) predicted by density functional theory, *Physical Chemistry Chemical Physics*, volume 24, 2022, 28055-28068.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計21件（うち査読付論文 21件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Tada Kohei, Masese Titus, Kanyolo Godwill Mbiti	4. 巻 207
2. 論文標題 Implications of coordination chemistry to cationic interactions in honeycomb layered nickel tellurates	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111322 ~ 111322
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2022.111322	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 Tada Kohei, Ozaki Hiroyuki, Fujimaru Koji, Kitagawa Yasutaka, Kawakami Takashi, Okumura Mitsutaka	4. 巻 20
2. 論文標題 Diradical Characters of s-Indaceno[1,2,3-cd;5,6,7-c'd']Diphenalene with and without Interaction with MgO(001)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 59 ~ 67
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2022-011	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 Fujimaru Koji, Tada Kohei, Ozaki Hiroyuki, Okumura Mitsutaka, Tanaka Shingo	4. 巻 33
2. 論文標題 Variation in spin contamination and diradical character with distance between a singlet biradical molecule and surface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Surfaces and Interfaces	6. 最初と最後の頁 102206 ~ 102206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.surfin.2022.102206	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 Tada Kohei, Kitta Mitsunori, Tanaka Shingo	4. 巻 24
2. 論文標題 Properties of spinel-type Ti-Li-M composite oxides (M = Li, Na, Cu, and Ag) predicted by density functional theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 28055 ~ 28068
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp03054c	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 Kataoka Riki, Taguchi Noboru, Tada Kohei, Machida Akihiko, Takeichi Nobuhiko	4. 巻 6
2. 論文標題 Improving Electrochemical Activity of P2 type Na ₂ /3Mn ₂ /3Ni ₁ /3O ₂ by Controlling its Crystallinity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Batteries & Supercaps	6. 最初と最後の頁 e202200462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/batt.202200462	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 Yamamoto Hiroki, Tada Kohei, Hwang Jinkwang, Hirai Daigorou, Hiroi Zenji, Matsumoto Kazuhiko, Hagiwara Rika	4. 巻 62
2. 論文標題 Mechanism of Reductive Fluorination by PTFE-Decomposition Fluorocarbon Gases for W ₀₃	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 2116 ~ 2127
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c03761	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 Goswami Chiranjita, Borah Biraj Jyoti, Das Ruprekha, Tada Kohei, Tanaka Shingo, Prosvirin Igor P., Ismagilov Ilyas Z., Matus Ekaterina V., Kerzhentsev Mikhail, Bharali Pankaj	4. 巻 948
2. 論文標題 CeO ₂ promotes electrocatalytic formic acid oxidation of Pd-based alloys	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 169665 ~ 169665
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2023.169665	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 Tada Kohei, Hinuma Yoyo, Ichikawa Satoshi, Tanaka Shingo	4. 巻 96
2. 論文標題 Investigation of the Interaction Between Au and Brookite TiO ₂ Using Transmission Electron Microscopy and Density Functional Theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 373 ~ 380
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20230007	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 多田 幸平	4. 巻 4
2. 論文標題 閉殻電子系に対する表面吸着及びスタッキング効果に関する理論研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 理論化学会誌 フロンティア	6. 最初と最後の頁 76 ~ 85
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 多田 幸平、尾崎 弘幸、藤丸 航志、北河 康隆、川上 貴資、奥村 光隆、田中 真悟	4. 巻 65
2. 論文標題 表面シラジカル性の解析技術の開発と表面吸着効果の理論検討	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 表面と真空	6. 最初と最後の頁 8 ~ 13
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 Tada Kohei, Kitta Mitsunori, Tanaka Shingo	4. 巻 51
2. 論文標題 CO Oxidation Activity of Au on Spinel Titanate Supports: Improvement of Catalytic Activity via Alkali Cation Substitution from Li ₄ Ti ₅ O ₁₂ to Na ₃ LiTi ₅ O ₁₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 157 ~ 161
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210594	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 Tada Kohei, Sakurai Hiroaki, Kitta Mitsunori, Yazawa Koji, Tanaka Shingo	4. 巻 304
2. 論文標題 A comparative study of the photocatalytic and optical properties of spinel-type titanates: A report for spinel sodium titanate	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Chemistry	6. 最初と最後の頁 122593 ~ 122593
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jssc.2021.122593	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 Tada Kohei, Ozaki Hiroyuki, Fujimaru Koji, Kitagawa Yasutaka, Kawakami Takashi, Okumura Mitsutaka	4. 巻 23
2. 論文標題 Can we enhance diradical character using interaction with stoichiometric surfaces of ionic oxides? A theoretical investigation using chemical indices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 25024 ~ 25028
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp03439a	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 Maruyama Tomohiro, Ohnari Jinta, Tada Kohei, Hinuma Yoyo, Kawakami Takashi, Yamanaka Shusuke, Okumura Mitsutaka	4. 巻 50
2. 論文標題 Extension of the Linear Response Function of Electron Density to a Plane-wave Basis and the First Application to Periodic Surface Systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1801 ~ 1805
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210375	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 Borah Biraj Jyoti, Goswami Chiranjita, Yamada Yusuke, Tada Kohei, Tanaka Shingo, Bharali Pankaj	4. 巻 35
2. 論文標題 Pd ₂ CuCo/C Hybrid with Nanoflower Morphology toward Oxygen Reduction and Formic Acid Oxidation Reactions: Experimental and Computational Studies	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Energy & Fuels	6. 最初と最後の頁 11515 ~ 11524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.energyfuels.1c00487	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 Goswami Chiranjita, Saikia Himadri, Jyoti Borah Biraj, Jyoti Kalita Manash, Tada Kohei, Tanaka Shingo, Bharali Pankaj	4. 巻 587
2. 論文標題 Boosting the electrocatalytic activity of Pd/C by Cu alloying: Insight on Pd/Cu composition and reaction pathway	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Colloid and Interface Science	6. 最初と最後の頁 446 ~ 456
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcis.2020.11.104	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 Tada Kohei, Hayashi Akihide, Maruyama Tomohiro, Koga Hiroaki, Yamanaka Shusuke, Okumura Mitsutaka, Tanaka Shingo	4. 巻 on-line published
2. 論文標題 Effect of surface interactions on spin contamination errors of homogeneous spin dimers, chains, and films: model calculations of Au/MgO and Au/BaO systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Molecular Physics	6. 最初と最後の頁 1 ~ 25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2020.1791989	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 Tada Kohei, Yamanaka Shusuke, Kawakami Takashi, Kitagawa Yasutaka, Okumura Mitsutaka, Yamaguchi Kizashi, Tanaka Shingo	4. 巻 765
2. 論文標題 Estimation of spin contamination errors in DFT/plane-wave calculations of solid materials using approximate spin projection scheme	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 138291 ~ 138291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2020.138291	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 Tada Kohei, Kitagawa Yasutaka, Kawakami Takashi, Okumura Mitsutaka, Tanaka Shingo	4. 巻 50
2. 論文標題 Electron Density-based Estimation of Diradical Character: An Easy Scheme for DFT/Plane-wave Calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 392 ~ 396
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200741	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 Tada Kohei, Mori Masahiro, Tanaka Shingo	4. 巻 50
2. 論文標題 Spin Contamination Errors in DFT+U/Plane-wave Calculations for Li_xFeF_3 Systems ($x = 0-1$)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1057 ~ 1061
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210040	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 Tada Kohei, Kitta Mitsunori, Tanaka Shingo	4. 巻 554
2. 論文標題 Detection of a real heterogeneous catalyst with an inactive oxygen-covered surface: Au/Li ₄ Ti ₅ O ₁₂	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 149624 ~ 149624
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2021.149624	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 -

〔学会発表〕 計4件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 多田 幸平、尾崎 弘幸、藤丸 航志、北河 康隆、川上 貴資、奥村 光隆
2. 発表標題 表面相互作用によるジラジカル性変調に関する理論研究
3. 学会等名 2021年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kohei Tada, Hiroyuki Ozaki, Koji Fujimaru, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura
2. 発表標題 Development of analysis method for DFT/plane-wave calculations of surfaces with open-shell electronic structures
3. 学会等名 ISSS9 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 多田 幸平、尾崎 弘幸、清林 哲、橘田 晃宜、田中 真悟
2. 発表標題 理論計算に基づく チタン酸スピネル骨格の安定性評価
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤丸 航志、奥村 光隆、多田 幸平、徳永 信
2. 発表標題 Au/NiO触媒によるアリルアルコール異性化反応における担体表面効果に関する理論研究
3. 学会等名 応用物理学会関西支部2021年度第2回講演会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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

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0件

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