

令和 3 年 8 月 18 日現在

機関番号：13302
 研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化）
 研究期間：2017～2020
 課題番号：16KK0097
 研究課題名（和文）3次元電子正孔系におけるポリ励起子相出現可能性の理論的解明（国際共同研究強化）
 研究課題名（英文）Theoretical investigation for the possibility of poly-exciton phase in 3-dim electron-hole gas(Fostering Joint International Research)
 研究代表者
 前園 涼（Maezono, Ryo）
 北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授
 研究者番号：40354146
 交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 10,200,000円
 渡航期間： 11ヶ月

研究成果の概要（和文）：ナノ・フォトリソグラフィの機能性を狙う物質中励起子物性の数値的理論的解明を目的として、遷移金属化合物系層状物質を対象とした研究を進めた。密度/有効質量/運動空間の次元性/量子統計性といった「舞台設定」の違いで、励起子相にどういった多様性（気相/分子相/結晶相）が生じるかという観点から「励起子相の大域的相図解明」に取り組んだ。研究課題にかかる直接的成果として、滞在先研究者との2報の共著論文成果をあげた（それぞれTop5%、Top10%）。
 研究室所属学生の来訪設定に積極的に取り組み、本課題の方法論となる量子モンテカルロ法電子状態計算に関連した国際協働を更に加速させた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電子と正孔からなる系は、半導体技術や触媒化学、光化学分野など、長く人類が機能性を引き出す対象として取り組んできた系である。歴史的には、発見的開拓に主導され、個別に研究が進んできたテーマであるが、本研究では改めて、電子正孔系として理論的に模式化した上で、電子正孔系に更なる未知の物性相が存在しうるかどうかを網羅的に探索し、その出現可能性を明らかにした。新規相それぞれに呼応して、未踏利用技術の可能性が広がっていると言える。本研究で明らかとなった出現域（電子密度などの実現条件）を狙った物質合成なども始まっており、あたらしい機能性を引き出す光応答デバイスの実現可能性に繋がる学術的・社会的意義を持つ。

研究成果の概要（英文）：To elucidate numerically and theoretically the exciton properties as the foundation of nano-photonics functionality, we studied layered materials including transition metal compounds by using quantum Monte Carlo electronic structure calculations. Global phase diagram of exciton phases has been investigated so that we can understand how the diversity of exciton phases (gas-/molecular-/crystal-phase) arises depending on the environments such as density/effective mass/dimensionality/particle statistics. As a direct result of the project, two co-authored papers are published achieving Top5% and Top10% citations, respectively. As a result of active efforts to setup the visits by the students from Japan during the project period, further acceleration of the international collaborations related to quantum Monte Carlo electronic structure calculations has been achieved, which is the central methodology used in the present research project.

研究分野：多体電子論を主務とした物性理論、および計算物理学

キーワード：計算物理 ハイパフォーマンス・コンピューティング 物性理論 量子エレクトロニクス 光物性

1. 研究開始当初の背景

光照射で物質中に発生する励起子はフォトニクスの素過程たる吸収/発光を担う。密度/有効質量/運動空間の次元性/量子統計性といった「舞台設定」の違いで、励起子は気相/分子相/結晶相など異なる様相を組み、呼応して吸収/発光に多彩なバリエーションをもたらす。ナノ構造制御により「舞台設定」を制御し、所望する機能性を狙うナノ・フォトニクス研究展開の上で、どのような条件(密度/有効質量/次元性/統計性)で如何なる励起子相が発現するかという「励起子相の大域的相図解明」は、量子多体理論での代表的課題の一つである。研究開始当時、研究代表者は信頼性の高い理論予見法「量子拡散モンテカルロ/密度行列/対分布解析法」を確立していた[R. Maezono *et al.*, **Phys. Rev. Lett.**(2013)、図 1]。

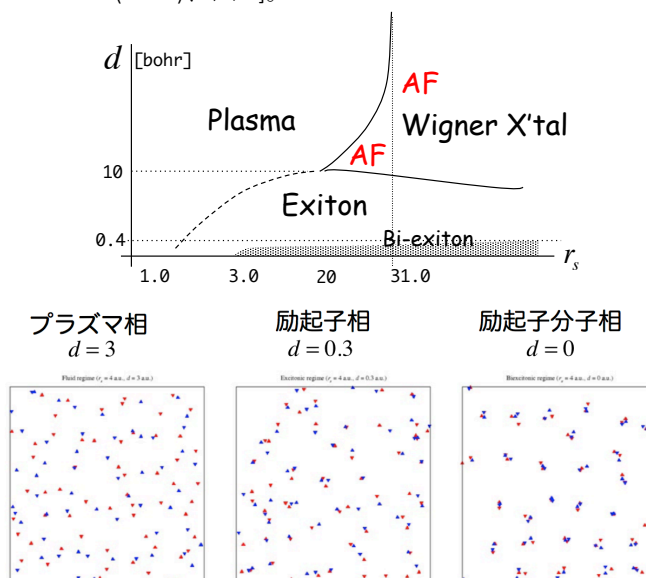


図 1；上図は研究代表者の手法で明らかにされた電子正孔二層膜の相図。横軸は電子間平均距離（濃度変化に相当）、縦軸は層間距離(いずれも Bohr 単位)である。rs=4.0 程度の距離では、層間を狭めるとプラズマ相→励起子気体相→励起子分子相と変化する事を予測する。下図は此等各相での粒子分布スナップショットの直接算定結果。

二次元系で確立させた手法を三次元系に拡張し、励起子液滴相、ポリ励起子相といった可能性解析を画策したが、研究期間中、二次元二層膜系での成果が、以下のように連鎖的に波及・急展開した：研究代表者らの成果[R. Maezono *et al.*, **Phys. Rev. Lett.**(2013)]は、特に高密度領域での予見について一部の期待にそぐわない事実を結論し、当初、厳しい批判に曝されたが、主に実験分野からの議論に基づいて、徐々にその結論が受け入れられた：当該系で励起子が発生すればコストリッツ・サウレス転移/超流動の振舞いが期待されるが、実験的には依然、観測がなされず、これが研究代表者らの励起子消失予見に起因するという着想が提起された。これを受けて一連の模型計算検証が、研究代表者らの結果を追う形でなされ、現在では、多体遮蔽模型の建て方に対する参照標準として研究代表者らの成果が引用されている。こうした波及を受け、層状カルコゲナイドなど半導体二層膜とは異なる遷移金属化合物系層状物質の解析に研究を展開した。特に新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」分野の実験研究者(京大/陰山教授グループ)と協力し、ある種の層状系で観測される長い励起子寿命の機構解明に関する研究を進めるうち、具体的なバンド構造から有効質量模型に持ち込む過程で、非自明な不安定格子振動モードを発見するなどの成果を得た[K. Nakano, K. Hongo, and R. Maezono, **Scientific Reports** (2016)、図 2]。

2. 研究の目的

以上のような背景の上で、国際的にも研究進展の急激であった遷移金属化合物系層状物質を対象をシフトして、そこでの励起子物性、特に長い励起子寿命の機構解明を目的とした研究を計画した。

3. 研究の方法

不純物に捕縛される励起子を、実効遮蔽パラメタと電子正孔質量比とで模式的に特徴づけた上で、電磁遮蔽を繰り返した実効相互作用下での励起子複合体波動関数を、量子拡散モンテカルロ法による多体変分法で取扱い励起子の束縛エネルギー値を評価する(ランカスター/Drummond 准教授、Szyniszewski 博士との協働、図 3)。束縛エネルギーの深さが、遮蔽パラメタや質量比にどのように依存するかを知ることによって、物質系ごとの励起子の出来やすさや寿命の物質依存性を議論する事が可能となる。電子正孔質量比を変化させる事で、系は連続的

に「ポジトロン/ミューオンのイオン、物質中のドナー・アクセプタなど不純物に捕縛された励起子」を記述出来る。特に「ドナーに捕縛された1励起子系、2励起子系」の束縛エネルギーを評価し、その差を比較することで物質中の励起子凝縮の可能性解明を進めた。電子正孔質量比と、実効相互作用での遮蔽効果パラメタの、2パラメタ空間中で電子正孔系の束縛エネルギー値を評価し、対数極限、クーロン極限での較正を行った後、全てのパラメタ点に対して拡散モンテカルロ法計算を進めた。

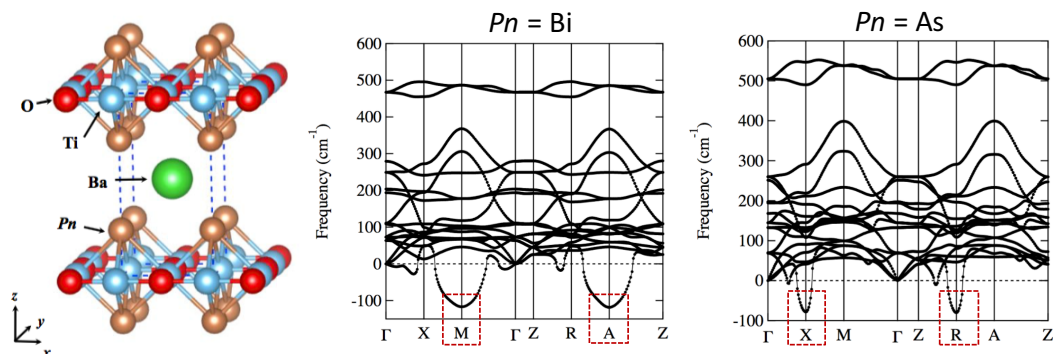


図 2 ; 二次元二層膜系への基課題の波及を受けて、層状酸化物物性における励起子寿命の問題に取り組んだ。この過程で、層状チタンニクタイト酸化物(結晶構造/左図)の電子状態が非自明なフォノン不安定モードを導くことを発見した。ニクトゲン(Pn)をBi, Sb, Asと置換してフォノン分散(中/右図)を算定すると、母体構造が同じであるにも関わらず、Asの場合だけ異なる位置に負の分散(中/右図中の破線)が現れる。この負フォノンモードに沿った自発的格子変形は、Asの場合、ごく最近、実験で報告された「従来理論で説明不能な超格子ピーク」を自然に説明する。

4. 研究成果

2018年度からの2カ年度で、それぞれの年度に半年ずつの現地滞在を行った。2019年秋に現地滞を終え、研究課題にかかる直接的成果としては、滞在先研究者との2報の共著原著論文(それぞれTop5%, Top10%)を残すことができた[1,2]。本事業による長期滞在先を通じ、研究代表者の研究室所属学生の来訪設定などに取り組んだ結果、これら学生を介在させた協働が進んだ。当該方法論に関連した研究展開として、「(1)米国協働先のアプリ QMCPackによる応用展開」、「(2)イタリア協働先のアプリ TurboRVBによる方法論深化」、「(3)英国協働先とのフォノン物性シミュレーションを用いた展開」の3つの方向性を提起し、これらに沿って研究を進めた。(1)に関しては、本研究室学生から協働先の博士研究員として転出した市場博士を通じ、複数の協働プロジェクトが走っており原著論文成果につながっている[3]。(2)に関しては、研究室メンバーの中野助教が日本学術振興会海外特別研究員制度で協働先に長期滞在先しており、継続的な原著論文成果をあげている[4-6]。(3)についても3報の共著原著論文につながっている[7-9]。(2)の課題については、その研究計画を発展させ、2021年度の科研費獲得に繋がっている[10]。

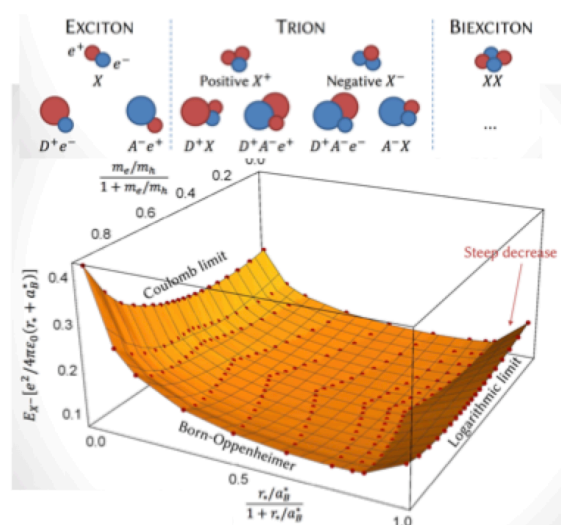


図 3 ; [0,1]区間にノーマライズされた電磁相互作用遮蔽パラメタ(左右方向)と電子正孔質量比(奥行き方向)の2パラメタ平面上で評価された電子正孔束縛エネルギー値(縦軸)。レリーフ手前側が「正電荷が原子核的に固定された極限(ボルン・オープンハイマー極限)」で、奥に向かうに従って原子核の動的な量子ダイナミクス効果が大

きくなる。

- [1] E. Mostaani, M. Szyniszewski, C.H. Price, R. Maezono, M. Danovich, N.D. Drummond, and V.I. Fal'ko, **Phys. Rev. B** 96, 075431 (2017) (IF = 3.836). (**Top 5%**)
- [2] R.J. Hunt, M. Szyniszewski, G.I. Prayogo, R. Maezono, N.D. Drummond, **Phys. Rev. B** 98, 075122 (2018/IF = 3.836) (**Top10%**)
- [3] T. Ichibha, A. Benali, K. Hongo, and R. Maezono, **Phys. Rev. Mater.** 3, 125801 (2019/IF = 3.337)
- [4] K. Nakano, R. Maezono, and S. Sorella, **J. Chem. Theory Comput.** 15, 4044-4055 (2019/IF = 5.39) (**Top25%**)
- [5] K. Nakano, R. Maezono, S. Sorella, **Phys. Rev. B** 101, 155106 (2020/IF = 3.836) (**Top25%**)
- [6] K. Nakano, T. Morresi, M. Casula, R. Maezono, S. Sorella, **Phys. Rev. B** 103, L121110 (2021/IF = 3.736).
- [7] J.C.A. Prentice, R. Maezono, and R.J. Needs, **Phys. Rev. B** 99, 064101 (2019/IF = 3.836)
- [8] S. Chen, R. Maezono, J. Chen, F.M. Grosche, C.J. Pickard, and B. Monserrat. **J. Phys. Mater.** 3, 015007 (2019/IF= NoStats (new journal)).
- [9] V-A. Ha, B. Karasulu, R. Maezono, G. Brunin, J.B. Varley, G-M. Rignanese, B. Monserrat, and G. Hautier, **Phys. Rev. Mater.** 4, 065401 (2020/IF = 2.926)
- [10] 「第一原理量子モンテカルロ法を用いた層状物質に対する第一原理フォノン計算の実現」、科学研究費助成事業基盤研究 C/研究代表者(課題番号 21K03400)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計57件（うち査読付論文 57件 / うち国際共著 30件 / うちオープンアクセス 56件）

1. 著者名 Utimula Keishu, Prayogo Genki I., Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 4
2. 論文標題 Stochastic Estimations of the Total Number of Classes for a Clustering having Extremely Large Samples to be Included in the Clustering Engine	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2000301(1~8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202000301	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 Utimula Keishu, Ichibha Tom, Prayogo Genki I., Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 11
2. 論文標題 A quantum annealing approach to ionic diffusion in solids	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7261(1~8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-86274-3	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 Nakano Kousuke, Morresi Tommaso, Casula Michele, Maezono Ryo, Sorella Sandro	4. 巻 103
2. 論文標題 Atomic forces by quantum Monte Carlo: Application to phonon dispersion calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L121110(1~7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L121110	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 Ghaffar Abdul, Ganeriwala Mohit D., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Mohapatra Nihar R.	4. 巻 6
2. 論文標題 Insights into the Mechanical and Electrical Properties of a Metal/Phosphorene Interface: An Ab Initio Study with a Wide Range of Metals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 7795 ~ 7803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c06255	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 Nikaido Yutaka, Ichihara Tom, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 11
2. 論文標題 GaN bandgap bias caused by semi-core treatment in pseudopotentials analyzed by the diffusion Monte Carlo method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 025225(1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0035047	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 Yoshida Tomohiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 4
2. 論文標題 Exploring Heat-Shielding Nanoparticle-Based Materials via First-Principles Calculations and Transfer Learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 1932 ~ 1939
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnm.0c03298	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 Pavan Kumar Naik Sugali, Iwasa Yuki, Kuramochi Kenta, Ichihara Yoshihisa, Kishio Kohji, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Nishio Taichiro, Ogino Hiraku	4. 巻 60
2. 論文標題 Synthesis, Electronic Structure, and Physical Properties of Layered Oxypnictides Sr ₂ ScCrAsO ₃ and Ba ₃ Sc ₂ Cr ₂ As ₂ O ₅	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1930 ~ 1936
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c03404	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 Gu Zhanyong, Cui Zhitao, Wang Zijing, Sinkou Qin Ken, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 393
2. 論文標題 Intrinsic carbon-doping induced synthesis of oxygen vacancies-mediated TiO ₂ nanocrystals: Enhanced photocatalytic NO removal performance and mechanism	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Catalysis	6. 最初と最後の頁 179 ~ 189
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcat.2020.11.025	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 Gu Zhanyong, Cui Zhitao, Wang Zijing, Qin Ken Sinkou, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Tsukuda Satoshi, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 279
2. 論文標題 Carbon vacancies and hydroxyls in graphitic carbon nitride: Promoted photocatalytic NO removal activity and mechanism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Catalysis B: Environmental	6. 最初と最後の頁 119376(1~11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apcatb.2020.119376	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 Oqmhula Kenji, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Ichibha Tom	4. 巻 5
2. 論文標題 Ab Initio Evaluation of Complexation Energies for Cyclodextrin-Drug Inclusion Complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 19371 ~ 19376
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01059	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 Hermawan Angga, Hanindriyo Adie Tri, Ramadhan Erland Rachmad, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Hongo Kenta, Inada Miki, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 7
2. 論文標題 Octahedral morphology of NiO with (111) facet synthesized from the transformation of NiOHCl for the NOx detection and degradation: experiment and DFT calculation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 3431 ~ 3442
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0QI00682C	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 Raghav Abhishek, Tri Hanindriyo Adie, Utimula Keishu, Abbasnejad Mohaddeseh, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 184
2. 論文標題 Intrinsic electronic defect states of anatase using density functional theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109925(1~10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109925	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 Hasegawa Takuya, Shigee Atsushi, Nishiwaki Yoshinori, Nagasako Makoto, Hanindriyo Adie Tri, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Ueda Tadaharu, Yin Shu	4. 巻 56
2. 論文標題 New layered perovskite family built from [CeTa2O7]- layers: coloring mechanism from unique multi-transitions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 8591 ~ 8594
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC03466E	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 Ha Viet-Anh, Karasulu Bora, Maezono Ryo, Brunin Guillaume, Varley Joel Basile, Rignanese Gian-Marco, Monserrat Bartomeu, Hautier Geoffroy	4. 巻 4
2. 論文標題 Boron phosphide as a p-type transparent conductor: Optical absorption and transport through electron-phonon coupling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 065401(1~8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.065401	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 Utimula Keishu, Hunkao Rutchapon, Yano Masao, Kimoto Hiroyuki, Hongo Kenta, Kawaguchi Shogo, Suwana Sujin, Maezono Ryo	4. 巻 3
2. 論文標題 Machine Learning Clustering Technique Applied to Powder X Ray Diffraction Patterns to Distinguish Compositions of ThMn12 Type Alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2000039(1~9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202000039	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 Yoshida Tomohiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 5
2. 論文標題 Synergy of Binary Substitutions for Improving the Cycle Performance in LiNiO2 Revealed by Ab Initio Materials Informatics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13403 ~ 13408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01649	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 Nakano Kousuke, Maezono Ryo, Sorella Sandro	4. 巻 101
2. 論文標題 Speeding up ab initio diffusion Monte Carlo simulations by a smart lattice regularization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155106(1~12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.155106	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 Toma Takahiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 3
2. 論文標題 Electrochemical Properties and Crystal Structure of Li+/H+ Cation-Exchanged LiNiO2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 4078 ~ 4087
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.0c00602	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 Botta Raju, Eiamchai Pitak, Horprathum Mati, Limwichean Saksorn, Chananonwathorn Chanunthorn, Patthanasettakul Viyapol, Maezono Ryo, Jomphoak Apichai, Nuntawong Noppadon	4. 巻 304
2. 論文標題 3D structured laser engraves decorated with gold nanoparticle SERS chips for paraquat herbicide detection in environments	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Sensors and Actuators B: Chemical	6. 最初と最後の頁 127327(1~12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.snb.2019.127327	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 Hanindriyo Adie Tri, Sridar Soumya, Kumar K.C. Hari, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 180
2. 論文標題 Ab initio thermodynamic properties of certain compounds in Nd-Fe-B system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109696(1~13)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109696	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 Oshima Takayoshi, Ichibha Tom, Oqmhula Kenji, Hibino Keisuke, Mogi Hiroto, Yamashita Shunsuke, Fujii Kotaro, Miseki Yugo, Hongo Kenta, Lu Daling, Maezono Ryo, Sayama Kazuhiro, Yashima Masatomo, Kimoto Koji, Kato Hideki, Kakahana Masato, Kageyama Hiroshi, Maeda Kazuhiko	4. 巻 59
2. 論文標題 Two-Dimensional Perovskite Oxynitride K ₂ LaTa ₂ O ₆ N with an H ⁺ /K ⁺ Exchangeability in Aqueous Solution to Form Stable Photocatalyst for Visible-Light H ₂ Evolution	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 6736 ~ 9743
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202002534	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 Nakamura Masashi, Oqmhula Kenji, Utimula Keishu, Eguchi Miharuru, Oka Kengo, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Maeda Kazuhiko	4. 巻 15
2. 論文標題 Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead Vanadium Oxyhalide Apatites Pb ₅ (VO ₄) ₃ X (X=F, Cl, Br, I)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 540 ~ 545
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201901692	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 Qin Ken Sinkou, Ichibha Tom, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 529
2. 論文標題 Inconsistencies in ab initio evaluations of non-additive contributions of DNA stacking energies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 110554(1~9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2019.110554	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 Chen Siyu, Maezono Ryo, Chen Jiasheng, Grosche F Malte, Pickard Chris J, Monserrat Bartomeu	4. 巻 3
2. 論文標題 Chemical and structural stability of superconducting In ₅ Bi ₃ driven by spin-orbit coupling	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Materials	6. 最初と最後の頁 015007(1~10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2515-7639/ab4c2b	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 Ahmad Faozan, Agusta Mohammad Kemal, Maezono Ryo, Dipojono Hermawan Kresno	4. 巻 32
2. 論文標題 A DFT+U study of H2O adsorption and dissociation on stoichiometric and nonstoichiometric CuO(111) surfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 045001(1~11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab4b34	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 Ichibha Tom, Benali Anouar, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 3
2. 論文標題 Ti interstitial flows giving rutile TiO2 reoxidation process enhancement in (001) surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 125801(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.125801	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 Takagishi Hideyuki, Masuda Takashi, Shimoda Tatsuya, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 123
2. 論文標題 Method for the Calculation of the Hamaker Constants of Organic Materials by the Lifshitz Macroscopic Approach with Density Functional Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8726 ~ 8733
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b06433	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 Utimula Keishu, Ichibha Tom, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 31
2. 論文標題 Ab Initio Search of Polymer Crystals with High Thermal Conductivity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 4649 ~ 4656
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.9b00020	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 Nakano Kousuke, Maezono Ryo, Sorella Sandro	4. 巻 15
2. 論文標題 All-Electron Quantum Monte Carlo with Jastrow Single Determinant Ansatz: Application to the Sodium Dimer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 4044 ~ 4055
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.9b00295	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 Iwasa Yuki, Ogino Hiraku, Song Dongjoon, Agulto Verdad C., Yamanoi Kohei, Shimizu Toshihiko, Ueda Jumpei, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Tanabe Setsuhisa, Sarukura Nobuhiko	4. 巻 30
2. 論文標題 Synthesis, optical properties, and band structures of a series of layered mixed-anion compounds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science: Materials in Electronics	6. 最初と最後の頁 16827 ~ 16832
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10854-019-01380-3	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 Yoshida Tomohiro, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 123
2. 論文標題 First-Principles Study of Structural Transitions in LiNiO2 and High-Throughput Screening for Long Life Battery	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14126 ~ 14131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b12556	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 Prabowo Wahyu Aji Eko, Subagjo, Nugraha, Agusta Mohammad Kemal, Saputro Adhitya Gandaryus, Rustad Supriadi, Maezono Ryo, Dino Wilson Agerico, Dipojono Hermawan Kresno	4. 巻 31
2. 論文標題 Density functional study of methyl butanoate adsorption and its C-O bonds cleavage on MoS2-based catalyst with various loads of Ni promoters	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 365001 ~ 365001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab2400	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 Yasunaga Takuya, Kobayashi Makoto, Hongo Kenta, Fujii Kotaro, Yamamoto Shunsuke, Maezono Ryo, Yashima Masatomo, Mitsuishi Masaya, Kato Hideki, Kakihana Masato	4. 巻 276
2. 論文標題 Synthesis of Ba _{1-x} Sr _x YSi ₂ O ₇ N and discussion based on structure analysis and DFT calculation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Chemistry	6. 最初と最後の頁 266 ~ 271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jssc.2019.05.012	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 Prentice Joseph C. A., Maezono Ryo, Needs R. J.	4. 巻 99
2. 論文標題 First-principles anharmonic vibrational study of the structure of calcium silicate perovskite under lower mantle conditions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 064101(1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.064101	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 Ichibha Tom, Prayogo Genki, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 21
2. 論文標題 A new ab initio modeling scheme for the ion self-diffusion coefficient applied to the β -Cu ₃ Sn phase of the Cu-Sn alloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 5158 ~ 5164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CP06271D	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 Asami Kazuki, Shiraiwa Masahiro, Ueda Jumpei, Fujii Kotaro, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Brik Mikhail G., Yashima Masatomo, Tanabe Setsuhisa	4. 巻 7
2. 論文標題 Crystal structure analysis and evidence of mixed anion coordination at the Ce ³⁺ site in Y ₃ Al ₂ (Al,Si) ₃ (O,N) ₁₂ oxynitride garnet phosphor	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 1330 ~ 1336
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8TC04980G	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 Matsumoto Yuki, Yamamoto Takafumi, Nakano Kousuke, Takatsu Hiroshi, Murakami Taito, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Ogino Hiraku, Song Dongjoon, Brown Craig M., Tassel Cedric, Kageyama Hiroshi	4. 巻 58
2. 論文標題 High-Pressure Synthesis of $A_2NiO_2Ag_2Se_2$ ($A=Sr, Ba$) with a High-Spin Ni^{2+} in Square-Planar Coordination	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 756 ~ 759
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201810161	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 Wakayama Haruki, Utimula Keishu, Ichibha Tom, Kuriki Ryo, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Oka Kengo, Maeda Kazuhiko	4. 巻 122
2. 論文標題 Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead Titanium Oxyfluoride Photocatalysts $Pb_2Ti_4O_9F_2$ and $Pb_2Ti_2O_5.4F_{1.2}$	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 26506 ~ 26511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b08953	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 Gharaei S. Khajoei, Abbasnejad M., Maezono Ryo	4. 巻 8
2. 論文標題 Bandgap reduction of photocatalytic TiO_2 nanotube by Cu doping	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 14192 ~ 14192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-018-32130-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 Hunt R. J., Szyniszewski M., Prayogo G. I., Maezono R., Drummond N. D.	4. 巻 98
2. 論文標題 Quantum Monte Carlo calculations of energy gaps from first principles	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 75122 ~ 75122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.075122	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 Asami Kazuki, Ueda Jumpei, Yasuda Kotaro, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Brik Mikhail G., Tanabe Setsuhisa	4. 巻 84
2. 論文標題 Development of persistent phosphor of Eu ²⁺ doped Ba ₂ SiO ₄ by Er ³⁺ codoping based on vacuum referred binding energy diagram	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Optical Materials	6. 最初と最後の頁 436 ~ 441
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.optmat.2018.07.021	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 Srihakulung Ornin, Maezono Ryo, Toochinda Pisanu, Kongprawechnon Waree, Intarapanich Apichart, Lawtrakul and Luckhana	4. 巻 86
2. 論文標題 Host-Guest Interactions of Plumbagin with α -Cyclodextrin, Dimethyl- β -Cyclodextrin and Hydroxypropyl- β -Cyclodextrin: Semi-Empirical Quantum Mechanical PM6 and PM7 Methods	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientia Pharmaceutica	6. 最初と最後の頁 20(1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/scipharm86020020	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 Kuriki Ryo, Ichibha Tom, Hongo Kenta, Lu Daling, Maezono Ryo, Kageyama Hiroshi, Ishitani Osamu, Oka Kengo, Maeda Kazuhiko	4. 巻 140
2. 論文標題 A Stable, Narrow-Gap Oxyfluoride Photocatalyst for Visible-Light Hydrogen Evolution and Carbon Dioxide Reduction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6648 ~ 6655
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b02822	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 T. Oshima, T. Ichibha, K.S. Qin, K. Muraoka, J.J.M. Vequizo, K. Hibino, R. Kuriki, S. Yamashita, K. Hongo, T. Uchiyama, K. Fujii, D. Lu, R. Maezono, A. Yamakata, H Kato, K. Kimoto, M. Yashima, Y. Uchimoto, M. Kakihana, O. Ishitani, H. Kageyama and K. Maeda,	4. 巻 57
2. 論文標題 Undoped Layered Perovskite Oxynitride Li ₂ LaTa ₂ O ₆ N for Photocatalytic CO ₂ Reduction with Visible Light	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 8154 ~ 8158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201803931	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 Hongo Kenta, Kurata Sinji, Jomphoak Apichai, Inada Miki, Hayashi Katsuro, Maezono Ryo	4. 巻 57
2. 論文標題 Stabilization Mechanism of the Tetragonal Structure in a Hydrothermally Synthesized BaTiO ₃ Nanocrystal	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 5413 ~ 5419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b00381	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 Ichibha Tom, Hongo Kenta, Motochi I., Makau N.W., Amolo G.O., Maezono Ryo	4. 巻 81
2. 論文標題 Adhesion of electrodes on diamond (111) surface: A DFT study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Diamond and Related Materials(IF = 2.561)	6. 最初と最後の頁 168 ~ 175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.diamond.2017.12.008	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 A. Jomphoak, T. Onjun, K. Hongo, R. Maezono	4. 巻 3
2. 論文標題 Density Functional Theory Simulations of Aluminium Alkoxide and Fluoride	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Int. J. New Tech. Res. (IJNTR)(IF = 2.254)	6. 最初と最後の頁 12 ~ 14
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 Kato Daichi, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Higashi Masanobu, Kunioku Hironobu, Yabuuchi Masayoshi, Suzuki Hajime, Okajima Hiroyuki, Zhong Chengchao, Nakano Kousuke, Abe Ryu, Kageyama Hiroshi	4. 巻 139
2. 論文標題 Valence Band Engineering of Layered Bismuth Oxyhalides toward Stable Visible-Light Water Splitting: Madelung Site Potential Analysis	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc. (IF = 13.858)	6. 最初と最後の頁 18725 ~ 18731
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b11497	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 Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 56
2. 論文標題 Investigation into Structural Phase Transitions in Layered Titanium-Oxypnictides by a Computational Phonon Analysis	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorg. Chem. (IF = 4.857)	6. 最初と最後の頁 13732 ~ 13740
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.7b01709	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 Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 13
2. 論文標題 A Computational Scheme To Evaluate Hamaker Constants of Molecules with Practical Size and Anisotropy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 5217 ~ 5230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.6b01159	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 E. Mostaani, M. Szyniszewski, C.H. Price, R. Maezono, M. Danovich, N.D. Drummond, and V.I. Fal'ko	4. 巻 96
2. 論文標題 Diffusion quantum Monte Carlo study of excitonic complexes in two-dimensional transition-metal dichalcogenides	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. (IF = 3.767)	6. 最初と最後の頁 075431 (1 ~ 24)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.075431	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 Etindele A.J., Maezono R., Melingui Melono R.L., Motapon O.	4. 巻 685
2. 論文標題 Influence of endohedral confinement of atoms on structural and dynamical properties of the C 60 fullerene	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters (IF = 1.815)	6. 最初と最後の頁 395 ~ 400
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2017.07.074	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 Ichibha Tom, Hou Zhufeng, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 7
2. 論文標題 New Insight into the Ground State of FePc: A Diffusion Monte Carlo Study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports(IF = 5.228)	6. 最初と最後の頁 1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-01668-6	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 Hanindriyo Adie Tri, Prawira T.B.M. Yusuf Yuda, Agusta Mohammad Kemal, Maezono Ryo, Dipojono Hermawan K.	4. 巻 170
2. 論文標題 Computational Design of Ni-Zn Based Catalyst for Direct Hydrazine Fuel Cell Catalyst Using Density Functional Theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Procedia Eng.(IF = 0.73)	6. 最初と最後の頁 148~153
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.proeng.2017.03.034	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 J. Trail, B. Monserrat, P.L. Rios, R. Maezono, and R.J. Needs	4. 巻 95
2. 論文標題 Quantum Monte Carlo study of the energetics of rutile,anatase, brookite and columbite TiO2 polymorphs	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B95(IF = 5.1)	6. 最初と最後の頁 121108(1~5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.95.121108	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 Ikebata Hisaki, Hongo Kenta, Isomura Tetsu, Maezono Ryo, Yoshida Ryo	4. 巻 31
2. 論文標題 Bayesian molecular design with a chemical language model	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Comput. Aided Mol. Des.(IF = 3.199)	6. 最初と最後の頁 379~391
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10822-016-0008-z	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 Nugraha, Saputro Adhitya Gandaryus, Agusta Mohammad Kemal, Yuliarto Brian, Dipojono Hermawan K., Rusydi Febdian, Maezono Ryo	4. 巻 410
2. 論文標題 Selectivity of CO and NO adsorption on ZnO (0002) surfaces: A DFT investigation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Surface Science (IF = 3.150)	6. 最初と最後の頁 373 ~ 382
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2017.03.009	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

[学会発表] 計45件 (うち招待講演 29件 / うち国際学会 21件)

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 やってみて理解したシミュレーション協働教育
3. 学会等名 第34期CMMフォーラム本例会 (社団法人 企業研究会) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 マテリアルズ・インフォマティクスの事例
3. 学会等名 科研費新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」Webセミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理計算を用いて物性を推定する仕組み
3. 学会等名 日本セラミックス協会2021年会基礎セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理量子モンテカルロ法を用いた量子多体系の研究
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「量子多体計算と第一原理計算の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Materials Informatics for high-thermal conductivity in polymers
3. 学会等名 The 7th International Symposium for Green-Innovation Polymers (GRIP2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 材料系シミュレーションにおける自作クラスタの活用
3. 学会等名 オープンCAE・Front ISTR合同シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 内村慶舟(発表者)、本郷研太、前園涼
2. 発表標題 ニューラルネットワークを利用したX線回折データの特徴量マッピング
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 奥村健司(発表者)、本郷研太、前園涼、市場友宏
2. 発表標題 シクロデキストリンドッキング系の第一原理結合エネルギー算定
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Genki Imam Prayogo(Presenter), T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono
2. 発表標題 A new ab initio modeling scheme for the ion self-diffusion coefficient applied to the e-Cu ₃ Sn phase of the Cu-Sn alloy
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 前園涼(発表者)、中野晃佑、S. Sorella
2. 発表標題 第一原理量子モンテカルロ法の最近の進展 I: TurboRVBにおける全電子DFT計算
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野晃佑(発表者)、前園涼、S. Sorella
2. 発表標題 第一原理量子モンテカルロ法の最近の進展 II: TurboRVBにおける全電子DMC計算
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Gewinner Senderanto Sinaga(Presenter), K. Utimula, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono
2. 発表標題 First principles calculations of superconducting transition temperature of ThCr ₂ Si ₂ -type structure
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 奥村健司(発表者)、本郷研太、前園涼、市場友宏
2. 発表標題 シクロデキストリンドッキング系の第一原理結合エネルギー算定
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 内村慶舟、市場友宏、本郷研太、中野晃佑、前園涼(発表者)
2. 発表標題 量子アニーリングを用いた固体中イオン拡散の取扱い
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 内村慶舟(発表者)、矢野正雄、木本博之、本郷研太、前園涼
2. 発表標題 自己符号化器による未知試料のXRD生成
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Adie Tri Hanindoriyo(Presenter), S. Sridar, K.C. Hari Kumar, K. Hongo, R. Maezono
2. 発表標題 Progress in establishing QMC-CALPHAD framework
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Genki Imam Prayogo(Presenter), A. Ushakov, T. Ichibha, K. Hongo, S. Streltsov, R. Maezono
2. 発表標題 Ground state determination of LiVX ₂ system using Diffusion Monte Carlo
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Gewinner Senderanto Sinaga(Presenter), K. Utimula, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono
2. 発表標題 First principles calculations of superconducting transition temperature of ThCr ₂ Si ₂ -type structure
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理計算を用いて物性を推定する仕組み
3. 学会等名 公益社団法人日本セラミックス協会2020年年会・基礎セミナー（招待講演）
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 K. Utimula(Presenter), M. Yano, H. Kimoto, K. Hongo, R. Maezono
2 . 発表標題 Characteristic space of XRD patterns in machine-learning
3 . 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 K. Oqnhula(Presenter), K. Hongo, R. Maezono, T. Ichibha
2 . 発表標題 Ab initio evaluation of complexation energies for cyclodextrin-drug inclusion complexes
3 . 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 K. Utimula, T. Ichibha, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono(Presenter)
2 . 発表標題 Quantum annealing applied to ionic diffusion analysis
3 . 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 K. Nakano(Presenter), R. Maezono, S. Sorella
2 . 発表標題 Recent progress in the first-principles quantum Monte Carlo: New algorithms in the all-electron calculations
3 . 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Ab initio Quantum Monte Carlo method; Role in Materials Genome
3. 学会等名 Asian Consortium on Computational Materials Science - International Conference on Materials Genome (ACCMS-ICMG) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Computational Approach to Material Design and Materials Informatics
3. 学会等名 African Materials Research Society meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions
3. 学会等名 XXI IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions
3. 学会等名 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions
3. 学会等名 20th International Union of Materials Research Societies International Conference in Asia (IUMRS-ICA) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions
3. 学会等名 European Advanced Materials Congress, International Association of Advanced Materials (IAAM) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions
3. 学会等名 WOS AOARD/seminar on Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Maezono(Presenter), K.S. Qin, T. Ichibha, K. Hongo
2. 発表標題 Difficulty to capture non-additive enhancement of stacking energy by conventional ab initio methods
3. 学会等名 CECAM Workshops "Improving the accuracy of ab-initio predictions for materials" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono(Presenter), A.J.W. Thom
2. 発表標題 Post Analyses of QMC Markov Chains Revisited
3. 学会等名 CECAM Workshops "Improving the accuracy of ab-initio predictions for materials" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Kesorn, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono(Presenter)
2. 発表標題 Computational phonon analysis applied to ThCr ₂ Si ₂ -type compounds
3. 学会等名 12th International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 High Performance Computing and Materials Simulations
3. 学会等名 Invited talk at NECTEC (National Institute of Electronics and Communication Technology) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Recent progresses of Materials Informatics
3. 学会等名 Seminar talk at Faculty of Science (Physics and Chemistry) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 R .Maezono
2. 発表標題 Computational Approach to Material Design
3. 学会等名 3rd RSU National and International Research Conference on Science and Technology, Social Science, and Humanities 2018 (RSUSSH 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理計算の産業応用に関する現状
3. 学会等名 (公財)計算科学振興財団主催・第2回産業用クラウドスパコン利用推進協力会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理計算の「おさえどころ」と「はじめかた」
3. 学会等名 科研費新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」第3回若手スクール(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 第一原理計算の産業応用と材料情報学展開
3. 学会等名 (公財)石川県産業創出支援機構・石川県次世代産業育成講座・新技術セミナー 先端素材産業におけるシミュレーション技術の活用(最先端バーチャル設計技術がもたらす第4次産業革命)(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 実験研究者を対象とした第一原理計算の技術移転に対する取組み
3. 学会等名 金属材料研究所講演会「中性子科学研究におけるJ-PARCとJRR-3の相補利用」(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 量子モンテカルロ法による電子状態計算
3. 学会等名 第7回量子化学スクール～基礎理論と複雑分子系の理論～ ポスト「京」重点課題5: 量子化学/計算物質科学人材育成コンソーシアム(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Computational Approach to Material Design
3. 学会等名 BICON-2017(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Nakano, K. Hongo and R. Maezono (Presenter)
2. 発表標題 Phonon-induced superlattice structures in titanium-oxypnictides superconductors
3. 学会等名 10th International Conference on Magnetic and Superconducting Materials (MSM17)(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Nakano, K. Hongo and R. Maezono (Presenter)
2. 発表標題 Phonon-induced superlattice structures in titanium-oxynictides superconductors
3. 学会等名 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCM-9) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 物質材料シミュレーションの垂直展開に向けて
3. 学会等名 第30期CAMMフォーラム本例会(社団法人 企業研究会) (招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計5件

1. 著者名 本郷 研太、室野 隆博、前園 涼	4. 発行年 2021年
2. 出版社 NTS出版	5. 総ページ数 284
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクス開発事例最前線 第3編第4節 (伊藤聡・監修)	

1. 著者名 前園 涼、本郷 研太、桑原 彰秀、越智 正之	4. 発行年 2021年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 264
3. 書名 複合アニオン化合物の科学 第5章 (陰山 洋、荻野 拓、長谷川 哲也編)	

1. 著者名 前園 涼、市場 友宏	4. 発行年 2020年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 208
3. 書名 動かして理解する 第一原理電子状態計算	

1. 著者名 前園涼、市場友宏	4. 発行年 2020年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 220
3. 書名 スベック理解から読み解く第一原理電子状態計算の実務理解	

1. 著者名 前園 涼	4. 発行年 2017年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 176
3. 書名 自作PCクラスタ超入門	

〔産業財産権〕

〔その他〕

北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科前園研究室ホームページ
<http://www.jaist.ac.jp/is/labs/maezono-lab/homepage2019/index.html>

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
主たる渡航先の主たる海外共同研究者	ドラモンド ニール (DRUMMOND Neil)	ランカスター大学・物理学科・講師	

	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
その他の研究協力者	ソレラ サンドロ (SORELLA Sandro)	先端研究国際大学院大学・物理学科・教授	
その他の研究協力者	レボレド フェルナンド (REBOREDO Fernando)	オークリッジ国立研究所・物理科学局・研究員	

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 3rd LOBSTER School/Explicit Chemical-Bonding Analysis of Materials from High-performance First-Principles Simulations	開催年 2019年～2019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		
英国	ランカスター大学	ケンブリッジ大学キャベンディッシュ研究所	
米国	オークリッジ国立研究所		
イタリア	先端研究国際大学院大学		