

令和 6 年 6 月 9 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02569

研究課題名（和文）マルチスケール量子シミュレーションによる動的不均一触媒理論

研究課題名（英文）Dynamical Theory for Heterogeneous Catalysts using Multi-scale Quantum Simulations

研究代表者

森川 良忠（Morikawa, Yoshitada）

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：80358184

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、大規模第一原理電子状態計算手法と動的モンテ・カルロ（kMC）法、機械学習原子間力場による分子動力学法などを組み合わせたマルチ・スケール・シミュレーションにより、メタノール合成触媒などで重要なCu表面上のステップの揺らぎ、CuZn表面合金の形成過程、COガス雰囲気下でのCu表面上でのCuクラスターの形成過程のシミュレーション、さらには自動車排ガス触媒で重要な酸化物に担持されたPdクラスターの温度と雰囲気ガスによる構造変化のシミュレーションに成功し、これらの現象の物理的要因を明らかにした。これらは複雑な実触媒の反応機構をシミュレーションで解明する端緒となる成果である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

不均一触媒はしばしば高温、高圧の条件下で行われるため、反応中の触媒の構造や化学的状態は常に動的に変化しており、反応中の触媒の状態を観測することが重要であると認識されている。本研究では、第一原理電子状態計算手法と統計力学的手法、および、機械学習法などを組み合わせることにより、有限温度、有限圧力下にある固体表面の動的な過程のシミュレーションに成功した。これは反応中の実触媒の表面化学反応過程を解明していく上で、本研究課題で進めてきた多階層連結計算手法が極めて有用な手法となることを示す重要な結果である。

研究成果の概要（英文）：In this research project, by using multi-scale simulation techniques that combine large-scale first-principles electronic structure calculation methods, a kinetic Monte Carlo (kMC) method, a molecular dynamics method based on machine learning inter-atomic potentials, Bayesian optimization methods, and evolutionary algorithms, we succeeded in simulating the fluctuations of steps on Cu surfaces, the formation process of CuZn surface alloys, and the formation process of Cu clusters on Cu surfaces in a CO gas atmosphere, as well as the structural changes due to temperature and atmospheric gases in Pd clusters supported on oxides, which are important in methanol synthesis catalysts and automobile exhaust catalysts. Through these simulations, we clarified the physical factors behind these phenomena. These results are the beginning of elucidating the complex reaction mechanisms of real catalysts through multi-scale simulations.

研究分野：電子常態理論

キーワード：DFT 表面 界面 触媒 機械学習 原子間力ポテンシャル 吸着 反応

1. 研究開始当初の背景

不均一触媒は、物質合成やエネルギー、環境問題など、様々な分野で重要な役割を果たしている。不均一触媒の固体や微粒子表面上では、反応物や反応中間体、生成物が吸着し、さらに、有限温度下での反応であるため、構造や化学的性質が常に変化している。特に高温・高圧の反応条件下での反応の場合は、触媒の状態が反応中に動的に大きく変化していると考えられる。不均一触媒反応の素過程を明らかにすることを目標として、原子レベルで良く規定された固体表面上での原子・分子の吸着や反応過程を研究する表面科学的研究が盛んに行われて来たが、同じ金属の表面でも現実の反応条件下での触媒と超高真空下での清浄な固体表面とでは反応性がかなり異なることがあり、いわゆる「プレッシャー・ギャップ」と呼ばれる問題として認識されてきた。

近年、このギャップを埋めるために、触媒反応動作中の EXAFS 観測や環境型透過型電子顕微鏡(環境型 TEM) さらに大気圧雰囲気下での X 線光電子分光などの実験的手法が実用化され、「オペランド計測」として研究が非常に盛んになって来ている。

一方、理論的な研究においては、DFT に基づく第一原理電子状態計算手法が極めて広く使われるようになって来ており、様々な固体表面構造、すなわち、平坦表面やステップ、キンクサイト、ナノクラスター上、さらには、担体上のクラスター触媒での分子の吸着エネルギーや反応の活性化障壁など精緻な研究が行われ、原子レベルでの触媒反応の理解が格段に進んできている。また、雰囲気ガスの影響による共吸着分子の影響を取り入れ、動的モンテカルロ (kMC) など、統計力学的手法と組み合わせる反応速度を議論する研究も行われて来ている (Stamatakis, J. Phys. Condens. Matter, 2015)。さらに、触媒の構造や化学的変化も取り入れるために、雰囲気ガスと触媒との熱力学的平衡を仮定して、触媒の温度と雰囲気ガス分圧の関数として相図を描くことが試みられている。

しかしながら、熱力学的に安定な構造は存在確率が高くなるが、必ずしも触媒として活性なサイトを提供しているとは限らない。むしろ、準安定な構造が生じた時に触媒反応の活性サイトとなり、多くの触媒サイクルが回転している可能性が高い。事実、DFT 計算により、平坦な安定表面よりも、ステップやキンクなどの熱力学的には不安定な構造の方が触媒反応の活性化障壁が低いことが多くのケースで示されている。触媒反応機構を真に理解するには、熱力学的に準安定ではあるが触媒反応的に非常に活性なサイトが、化学反応が進行している非平衡状態下ではどの程度生じ、それらが触媒反応全体にどの程度寄与しているか、という点を明らかにすることが重要となってくる。

2. 研究の目的

本研究課題では、大規模第一原理電子状態計算手法と動的モンテ・カルロ (kMC) 法などを組み合わせたマルチ・スケール・シミュレーションにより、温度や雰囲気ガスの圧力下での不均一触媒の動的変化も含めた触媒反応過程を原子レベルから明らかにすることを可能にし、具体的な不均一触媒反応に適用することを目的とする。シミュレーションの結果を最新の実験と比較するとともに、触媒の反応性を支配する要因を解明し、より効率的な触媒を設計する指針を与えることに繋がる。

3. 研究の方法

目的を達成するためのアプローチとして、3つの方法を試みた。まず、一つ目は、第一原理電子状態計算と kMC を組み合わせる方法である。この方法を Cu 表面上の Cu 原子拡散の問題に適用した。Cu 表面上のさまざまな Cu 原子配列について電子状態計算を行い、Cu 原子間相互作用エネルギーをクラスター展開により表現し、また、拡散障壁についてもクラスター展開してパラメータ化した。それらのパラメータを用いて Cu 表面上の Cu 原子の拡散について kMC を用いてシミュレーションを行った。kMC は第一原理計算で求めたエネルギー障壁を用いて、数ミリ秒から数時間のオーダーまでの現象の予測をすることができる。第一原理分子動力学法では数十ピコ秒程度が限界であることを考えると、時間スケールを 9 桁~12 桁拡大することが可能になる。しかしながら、kMC ではあらかじめ起こり得る過程をリストアップしておく必要がある。反応過程が未知である場合は kMC は用いることができない。また、kMC では Cu 表面上の原子拡散のように吸着サイトが決まっている場合はモデル化できるが、吸着によって表面の構造が大きく変わってしまうと、モデル化が非常に困難となる。そこで、次に述べる機械学習ポテンシャルを用いたシミュレーションを行うことにより、これらの問題を解決することが可能となる。

二つ目の方法は第一原理電子状態計算を用いてさまざまな構造のエネルギーと原子間力を計算し、そのデータから機械学習原子間力ポテンシャルを構築し、作成した力場を用いて古典分子動力学法により表面上での原子拡散や反応を見る方法である。図 1. に示すように第一原理電子状態計算プログラム (STATE)を用いて様々な構造のエネルギーと原子間力を求め、そのデータをガウス過程回帰による原子間力ポテンシャルを作成し (FLARE)、古典分子動力学法計算を実行し (LAMMPS)、結果を python によるプログラムで解析を行うこととした。これらのプログラムをうまく連結して密度汎関数法の精度で長時間、大規模のシミュレーションを行い、その結果が

ら重要な現象を抜き出し、その解析を行うこととした。

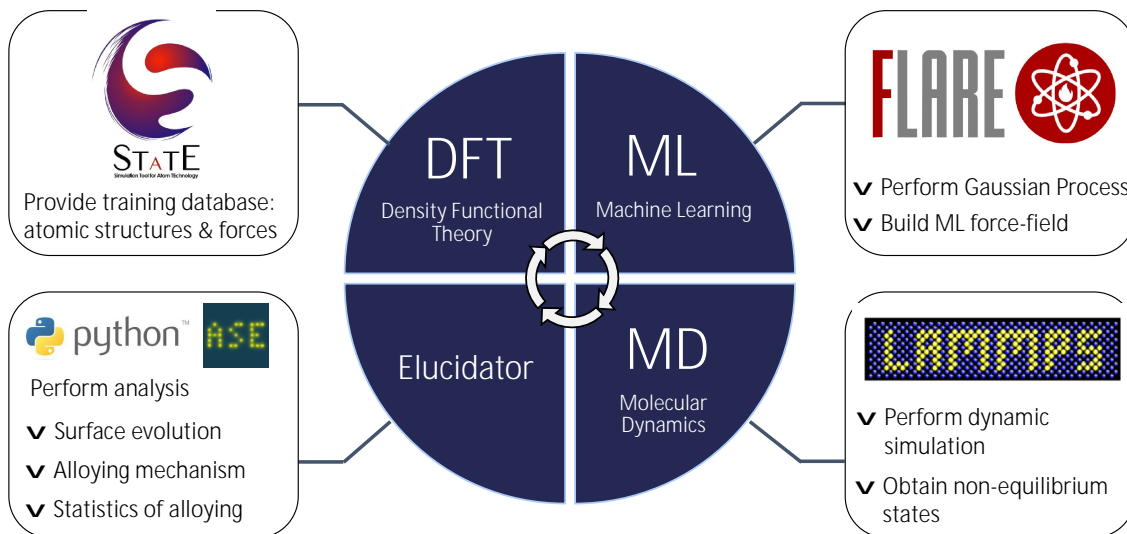


図 1. 第一原理電子状態計算と機械学習原子間力ポテンシャル、古典分子動力学法プログラム、パイソンによる結果解析プログラムを連携させた方法。

三つ目の方法は、デンマークのオーフス大学の Bjørk Hammer 教授のグループで開発されている global optimization with first-principles energy expression (GOFEE) という方法を用いて酸化物に担持された Pd クラスタ触媒の構造について、酸素の化学ポテンシャルの関数として求めた。この方法は、進化的アルゴリズムで新たな候補の構造を作成し、その構造を局所緩和する際に計算量が多い第一原理電子状態計算結果からガウス過程回帰で構築した代替モデルを用いることにより、大幅に計算時間を減らすことが可能にする手法である。候補構造の局所緩和を行い、最も有望な候補の構造についてのみ、第一原理電子状態計算を行い、それを学習データに加えて代替モデルを更新していく方法である。

4. 研究成果

まず、本研究計画の出発点として、DFT-KMC シミュレーションツールを使用して、Cu(111) 表面上の Cu 吸着原子の拡散を調べた (H. H. Halim, S. E. M. Putra, F. Muttaqien, I. Hamada, K. Inagaki, Y. Hamamoto, and Y. Morikawa, “Multi-scale Simulation of Equilibrium Step Fluctuations on Cu(111) Surface”, *ACS Omega*, **6**, 5183-5196 (2021).)。この系を取り上げた理由は二つある。一つは、Cu 表面の研究は、工業用触媒 Cu/ZnO/Al₂O₃ の活性部位の解明で重要であること、第二に Cu のホモエピタキシャル成長は良く研究されており、多数の理論的および実験的報告があり、動的シミュレーション結果の妥当性を確かめるための比較対象の研究が多いことである。本研究では、クラスター展開 (CE) を採用した DFT-KMC シミュレーションを使用して、特にステップやキンクなどの欠陥を含む Cu の表面拡散の微視的メカニズムを解明した。

次に、機械学習法により DFT の結果を用いて精度の高い原子間ポテンシャルを作成し、機械学習原子間ポテンシャル (MLP) を用いて分子動力学計算 (MD) を行い、CuZn 表面の合金化過程の高精度大規模シミュレーションを行うことに成功した (H.H.Halim and Y. Morikawa, *ACS Physical Chemistry Au*, **2**, 430-447 (2022).)。図 2 の上のパネルは Cu(997) ステップ表面に Zn を蒸着した構造を出発点として、700K でアニールした時の表面構造の変化を示している。図中の緑の原子は Cu 原子を表し、赤は配位数が 8 以下を持つ Zn 原子を示し、青は配位数が 9 以上を持つ Zn 原子を示す。すなわち、赤の Zn は表面において、周りを完全には他の原子で囲まれておらず、その意味で「吸着 Zn 原子」と呼ぶこととし、青の原子は表面において周りを完全に他の原子で囲まれているので、「合金化 Zn 原子」と呼びこととする。そうすると、初期は吸着 Zn 原子が多いが徐々に合金化 Zn 原子へと移り変わっていくことがわかる。その過程を詳細に調べたところ、ステップがほとんどの場合関与していることがわかった。ステップで合金化が起こることにより、その活性化エネルギーは低くなる。時間が経過するとテラスの中程でも合金化した Zn が観測されるが、それらの合金化 Zn 原子も合金化する過程ではステップが関与していることも明らかとなった。

三番目の課題として CO の雰囲気ガス中で Cu 表面上に小さなクラスターが多数生成する状況をシミュレーションにより再現し、その生成過程を明らかにすることに成功した (H.H. Halim and Y. Morikawa, *J. Phys. : Condens. Matter*, **35**, 495001 (18pp) (2023).)。クラスター形成は触媒の活性を高める重要な要因と考えられる。図 2 の下左図に示すように、CO 分子がない場合は、Cu(111) 表面上にある Cu アイランドは 550K でも安定で、ほとんど Cu がメインのアイランドから外れることは無い。しかしながら、図 2 の下右図に示すように、気相の CO 分子と平衡にある Cu 表面では CO 分子が表面に吸着し、それによって Cu のメインのアイランドから Cu 原子が頻りに外れてアドアトムや小さなクラスターを形成することが観測された。クラスター形成は触媒の

活性を高める重要な要因と考えられ、表面科学分野で長年の問題であった「プレッシャー・ギャップ」を解決するための重要なステップとなる研究成果である。

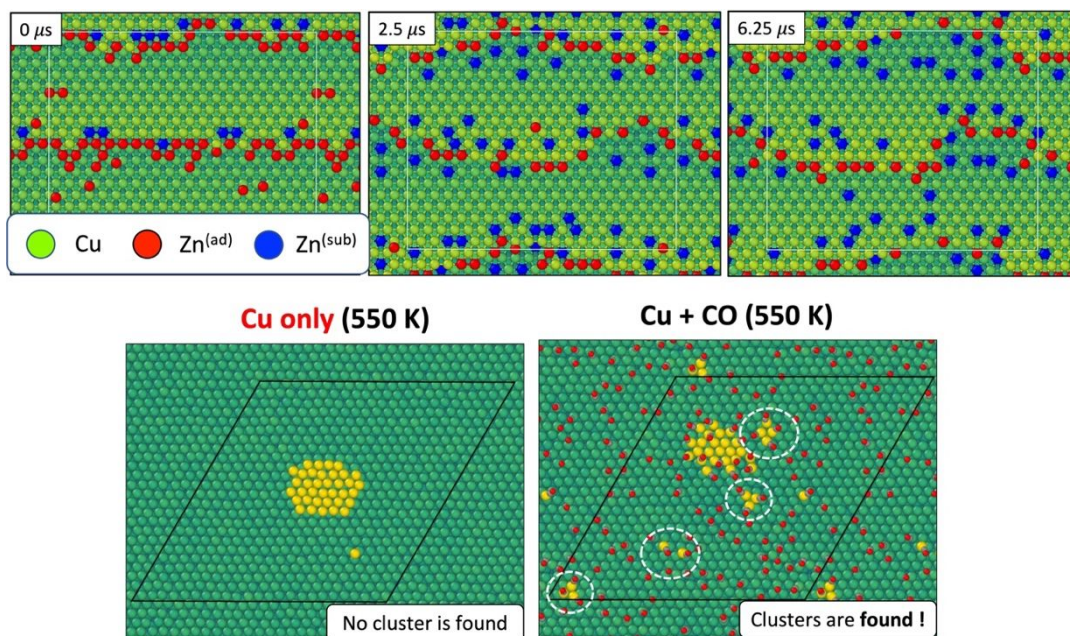


図2. (上)Cu(997)表面上での CuZn 合金形成過程のシミュレーション。(下)CO 雰囲気中での Cu 表面上での小さい Cu クラスターの形成過程。

四つ目の課題として、金属微粒子を酸化物担体に担持させた不均一系触媒の研究を行なった。金属を担持した酸化物触媒は自動車排気ガス浄化三元触媒(TWC)や燃料電池電極触媒など多くの応用上重要な触媒で利用されている。これらの不均一触媒は高い活性と選択性ととも熱安定性が産業用途の触媒設計において極めて重要である。特に TWC は、反応条件下での時間の経過による金属微粒子の凝集(焼結)に起因する熱劣化が大きな懸念事項である。熱劣化を抑制する上で金属クラスターと酸化物担体の相互作用は重要な役割を果たす。金属微粒子と担体酸化物の相互作用が弱いと、金属微粒子同士が凝集して粒径が大きくなり、表面積が小さくなることにより触媒活性が低下する。金属微粒子と担体酸化物との相互作用が大きくなると、金属微粒子がしっかりと担体酸化物に結合するため、熱劣化が抑制されるようになるが、相互作用がさらに強くなると金属微粒子が酸化物担体中に固溶するようになりこれも熱劣化のもう一つの要因となる。そのため、金属微粒子と担体酸化物との相互作用は凝集と固溶の両方を抑制する相互作用を実現することが必要となる。最近、Ruddlesden-Popper 型の酸化物に金属微粒子を担持すると熱劣化が極めて良く抑制されることが京都大学の実験グループで見出されているが、その機構の解明には至っていない。本研究は、金属微粒子と Ruddlesden-Popper 型酸化物との相互作用について、第一原理電子状態計算手法と機械学習法を組み合わせた大規模な計算機シミュレーションによりその本質を解明し、熱劣化を抑制する要因を明らかにし、より望ましい触媒を設計する指針を与えることを目的として研究を行なった(T. N. Pham, B. A. Choi Tan, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, and Y. Morikawa, “Stability of Pd_xO_y Particles Supported on Strontium Titanate Perovskite under Three-Way Catalyst Operating Conditions: Implications for Sintering Resistance”, ACS Catal. 14, 1443-1458 (2024).)。

Pd 固溶体は、気相 O₂ との平衡における Pd@STO-327 の安定性を解明することによって調べた。(001) ファセットの 5 つの異なる表面終端を持つ STO-327 の結晶構造を図 3(a) に示す。(ΔμO, ΔμSr)空間の安定相を図 3(b) に示す。斜線領域は、関連化合物 (SrO, TiO₂, Ti, Sr, および O₂) の析出のないバルク STO-327 の安定領域を表し、典型的な TWC 動作条件は 2 本の白い点線で限定された領域に位置、すなわち $-3.22 \text{ eV} < \Delta\mu_{\text{O}} < -1.08 \text{ eV}$ の範囲になる。図 3(b) に示すように、元の STO-327 は還元条件 ($\Delta\mu_{\text{O}} < \sim -1.8 \text{ eV}$) 下で最も安定な相だが、Pd 原子が Ti サイトを占める Pd 固溶体が好ましく形成され (Pd@Ti, 3Pd@Ti, および 4Pd@Ti)、酸化条件 ($\Delta\mu_{\text{O}} > \sim -1.8 \text{ eV}$) 下で欠陥なく生成した。バルク PdO で形成された平面 PdO₄ 配位が Pd@STO-327 では形成できないことを見出した。バルク STO-327 で PdO₄ 構成を形成するには、2 つの VO 形成が必要である。Pd@Ti の場合、これはかなり還元的な条件下、つまり $\Delta\mu_{\text{O}} < -7.1 \text{ eV}$ で起こり、Pd@STO-327 では平面 PdO₄ 配位がほとんど形成されないことを示している。TiO₂ リッチ状態 [線(2)付近の領域] から SrO リッチ状態 [線(1)付近の領域] に環境を変化させると、より低い ΔμO (-0.8 ~ -1.7 eV) で Pd 固溶が良好となる。SrO リッチ条件下で Pd の SSR がより容易に進行することを示している。したがって、Pd 固溶体は、Pd が Ti サイトに組み込まれる酸化 SrO リッチ条件下で熱力学的に好ましい。SSR の出現により、STO-327 を含む

Pd ナノ粒子 の強い金属-担体相互作用が示された。

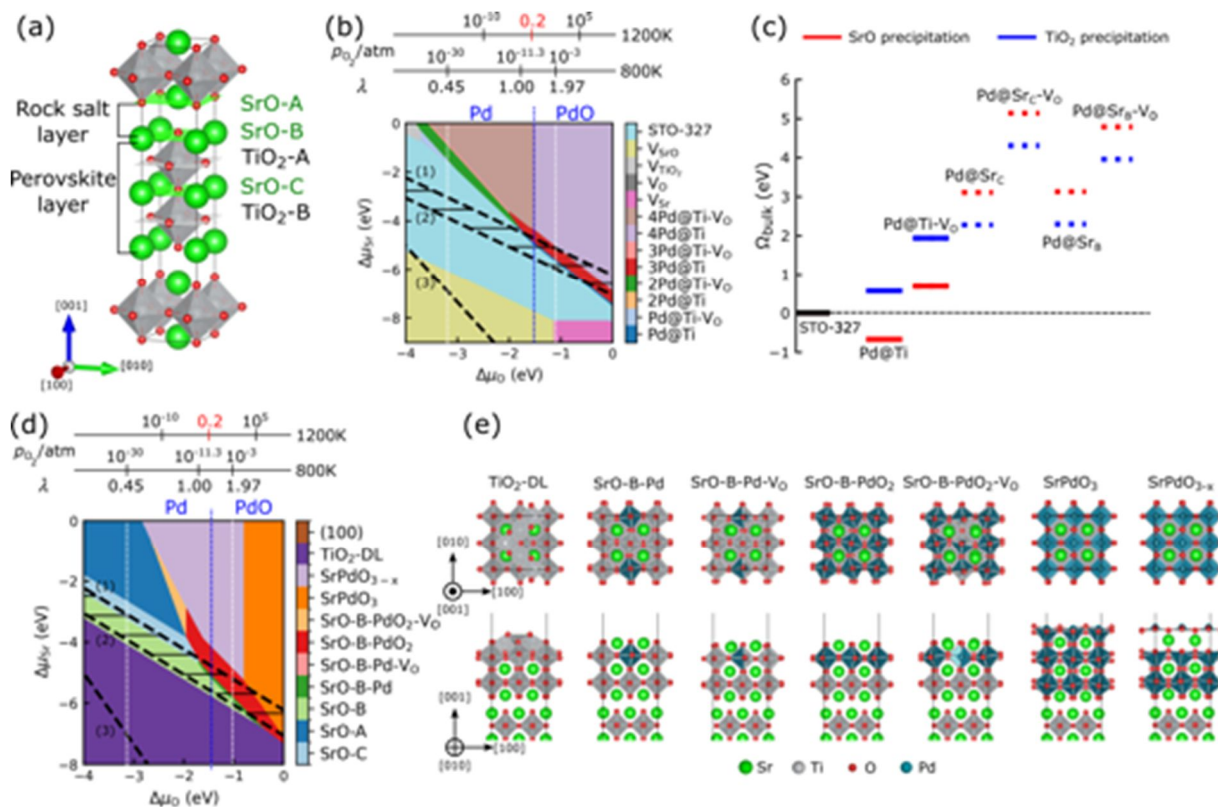


図3. (a) さまざまな終端 (001) 面を持つ STO-327 の結晶構造。 (b) $(\Delta\mu\text{O}, \Delta\mu\text{Sr})$ 空間におけるいくつかの欠陥と Pd@STO-327 を含む STO-327 の状態図。 (c) 燃料リーン条件下でのペロブスカイト層 (Pd@SrC) および岩塩層 (Pd@SrB) で Ti (Pd@Ti) および Sr を置換した単一 Pd のグランドポテンシャル。 SrO と TiO₂ の析出境界におけるグランドポテンシャルは、それぞれ赤と青で示されている。 Pd@Ti, Pd@Ti-Vo, および Pd@Sr のグランドポテンシャルに対するフォノンの寄与が示されている。 (d) $(\Delta\mu\text{O}, \Delta\mu\text{Sr})$ 空間における STO-327 の (001) および (100) 面の状態図、および (e) STO-327 (001) の原子モデル。 状態図の斜線領域は、STO-327 が関連化合物の析出がなく熱力学的に安定している領域に対応する。これは、(1) SrO, (2) TiO₂, (3) Ti, および O₂ ($\Delta\mu\text{O} \leq 0$) によって定義される。 2 つの白い点線の間領域は、TWC の典型的な O₂ 条件に対応する。 青い線は、 $\Delta\mu\text{O} = -1.59$ eV でのバルク PdO/Pd 熱力学的相平衡を表す。

GOFEE と熱力学を組み合わせた DFT 計算を使用して、三元触媒動作条件下での強い金属-担体相互作用を解明することにより、STO-327 上の担持酸化 Pd₂O₃ 粒子が自己再生触媒の条件を満たすことを実証した。 まず、Pd 固溶体は酸化性雰囲気において好ましいことが判明した。 しかし、岩塩 SrO 層には、STO-327(001) からバルク領域への Pd の浸透を緩和する能力があり、固溶体形成の抑制につながると予測された。 第二に、PdO のように酸化されたクラスターの方が Pd 金属クラスターよりも担体表面に強く結合することを示した。これは、クラスターの酸化により焼結に対する熱安定性が向上する可能性があることを意味する。 酸化物担体とクラスターのサイズがクラスターの安定性に及ぼす影響は、電荷移動相互作用が重要な役割を果たすことが明らかとなった。 この発見は、金属の酸化状態の役割に関する独自の洞察を提供し、担持された金属クラスターの安定性における相互作用をサポートし、熱劣化耐性三元触媒の開発に役立つと期待される。

以上のように、第一原理電子状態計算、機械学習ポテンシャル、ベイズ最適化法、キネティック・モンテ・カルロ法などを組み合わせることにより、雰囲気ガスや有限温度下での触媒の構造変化や反応過程を明らかにすることに成功し、実触媒表面での反応過程を解明するためには、このようなシミュレーションが有望であるとの成果が得られた。 今後はさらに、計算精度と複雑な系を効率的に取り扱えるように手法を拡張していく必要がある。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計23件（うち査読付論文 23件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 13件）

1. 著者名 Wong YeeJie, Choi Young Hyun, Tanaka Shunsuke, Yoshioka Haruka, Mukai Kozo, Halim Harry H., Mohamed Abdul Rahman, Inagaki Kouji, Hamamoto Yuji, Hamada Ikutaro, Yoshinobu Jun, Morikawa Yoshitada	4. 巻 125
2. 論文標題 Adsorption of CO ₂ on Terrace, Step, and Defect Sites on Pt Surfaces: A Combined TPD, XPS, and DFT Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 23657 ~ 23668
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c05228	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 Wong YeeJie, Halim Harry H., Khairudin N. Fazila, Pham Thanh Ngoc, Putra Septia E. M., Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Hamada Ikutaro, Mohamed Abdul Rahman, Morikawa Yoshitada	4. 巻 125
2. 論文標題 Dry Reforming of Methane on Cobalt Catalysts: DFT-Based Insights into Carbon Deposition Versus Removal	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 21902 ~ 21913
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c04819	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 Alaydrus Musa, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 23
2. 論文標題 Mechanistic insight into oxygen vacancy migration in SrFeO _{3-δ} from DFT+U simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 18628 ~ 18639
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp02452c	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 Putra Septia Eka Marsha, Morikawa Yoshitada, Hamada Ikutaro	4. 巻 780
2. 論文標題 Isotope effect of methane adsorbed on fcc metal (111) surfaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 138943 ~ 138943
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2021.138943	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 Rojas Kurt Irvin M., Cuong Nguyen Thanh, Nishino Hiroaki, Ishibiki Ryota, Ito Shin-ichi, Miyuchi Masahiro, Fujimoto Yoshitaka, Tominaka Satoshi, Okada Susumu, Hosono Hideo, Arboleda Nelson B., Kondo Takahiro, Morikawa Yoshitada, Hamada Ikutaro	4. 巻 2
2. 論文標題 Chemical stability of hydrogen boride nanosheets in water	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 81-1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-021-00184-5	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 該当する

1. 著者名 Kuroishi Kenta, Al Fauzan Muhammad Rifqi, Pham Thanh Ngoc, Wang Yuelin, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Shiotari Akitoshi, Okuyama Hiroshi, Hatta Shinichiro, Aruga Tetsuya, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 23
2. 論文標題 A flat-lying dimer as a key intermediate in NO reduction on Cu(100)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 16880~16887
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP02746H	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 Putra Septia Eka Marsha, Muttaqien Fahdzi, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Shiotari Akitoshi, Yoshinobu Jun, Morikawa Yoshitada, Hamada Ikutaro	4. 巻 5
2. 論文標題 Theoretical study on adsorption and reaction of polymeric formic acid on the Cu(111) surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 075802-1~9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.075801	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 Ta Luong Thi, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada, Dinh Van An	4. 巻 11
2. 論文標題 Adsorption of toxic gases on borophene: surface deformation links to chemisorptions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 18279~18287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1RA02738G	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 Enriquez John Isaac, Muttaqien Fahdzi, Michiuchi Masato, Inagaki Kouji, Geshi Masaaki, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 174
2. 論文標題 Oxidative etching mechanism of the diamond (100) surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 36 ~ 51
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2020.11.057	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 Shiotari Akitoshi, Putra Septia Eka Marsha, Shiozawa Yuichiro, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Morikawa Yoshitada, Sugimoto Yoshiaki, Yoshinobu Jun, Hamada Ikutaro	4. 巻 17
2. 論文標題 Role of Intermolecular Interactions in the Catalytic Reaction of Formic Acid on Cu(111)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Small	6. 最初と最後の頁 2008010 ~ 2008010
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/small.202008010	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 Halim Harry Handoko, Putra Septia Eka Marsha, Muttaqien Fahdzi, Hamada Ikutaro, Inagaki Kouji, Hamamoto Yuji, Morikawa Yoshitada	4. 巻 6
2. 論文標題 Multi-scale Simulation of Equilibrium Step Fluctuations on Cu(111) Surfaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 5183 ~ 5196
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c05064	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 Wang Yuelin, Ngoc Pham Thanh, Tian Yu, Morikawa Yoshitada, Yan Likai	4. 巻 585
2. 論文標題 Density functional theory study on a nitrogen-rich carbon nitride material C3N5 as photocatalyst for CO2 reduction to C1 and C2 products	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Colloid and Interface Science	6. 最初と最後の頁 740 ~ 749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcis.2020.10.054	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 Wang Yuelin, Pham Thanh Ngoc, Yan Likai, Morikawa Yoshitada	4. 巻 10
2. 論文標題 Activity and selectivity of N ₂ fixation on B doped g-C ₃ N ₄ : a density functional theory study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 11791 ~ 11800
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2TC02041F	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 Pham Thanh Ngoc, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 6
2. 論文標題 Density functional theory study of NO-H ₂ O coadsorption on Cu(111)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 75801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.6.075801	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 Halim Harry H., Morikawa Yoshitada	4. 巻 2
2. 論文標題 Elucidation of Cu-Zn Surface Alloying on Cu(997) by Machine-Learning Molecular Dynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Physical Chemistry Au	6. 最初と最後の頁 430 ~ 447
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acspchemau.2c00017	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 Choi Young Hyun, Putra Septia Eka Marsha, Shiozawa Yuichiro, Tanaka Shunsuke, Mukai Kozo, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada, Yoshinobu Jun	4. 巻 732
2. 論文標題 The quantitative study of methane adsorption on the Pt(997) step surface as the initial process for reforming reactions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 122284 ~ 122284
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2023.122284	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 Wang Yuelin, Pham Thanh Ngoc, Halim Harry H., Yan Likai, Morikawa Yoshitada	4. 巻 4
2. 論文標題 DFT investigation of the oxygen reduction reaction over nitrogen (N) doped graphdiyne as an electrocatalyst: the importance of pre-adsorbed OH* and the solvation effect	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Advances	6. 最初と最後の頁 6542 ~ 6552
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3MA00502J	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 Al Fauzan Muhammad Rifqi, Pham Thanh Ngoc, Halim Harry Handoko, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 127
2. 論文標題 First-Principles Microkinetic Study of NO Reduction on Cu Catalysts	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 19451 ~ 19467
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c02820	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 Halim Harry H, Ueda Ryo, Morikawa Yoshitada	4. 巻 35
2. 論文標題 Machine learning molecular dynamics simulation of CO-driven formation of Cu clusters on the Cu(111) surface	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 495001 ~ 495001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/acf2d8	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 Nagita Kaito, Kamiya Kazuhide, Nakanishi Shuji, Hamamoto Yuji, Morikawa Yoshitada	4. 巻 128
2. 論文標題 CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 4607 ~ 4615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.4c00666	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 Pham Thanh Ngoc, Andrea Choi Tan Beatriz, Hamamoto Yuji, Inagaki Kouji, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 14
2. 論文標題 Stability of PdxOy Particles Supported on Strontium Titanate Perovskite under Three-Way Catalyst Operating Conditions: Implications for Sintering Resistance	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 1443 ~ 1458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.3c05673	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 Enriquez John Isaac G., Yamasaki Takahiro, Michiuchi Masato, Inagaki Kouji, Geshi Masaaki, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 128
2. 論文標題 Origin of the Surface Facet Dependence in the Oxidative Etching of the Diamond (111) and (100) Surfaces from First-Principles Calculations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 6294 ~ 6308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c08378	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 Enriquez John Isaac G., Halim Harry Handoko, Yamasaki Takahiro, Michiuchi Masato, Inagaki Kouji, Geshi Masaaki, Hamada Ikutaro, Morikawa Yoshitada	4. 巻 226
2. 論文標題 Origin of the surface facet dependence in the thermal degradation of the diamond (111) and (100) surfaces in vacuum investigated by machine learning molecular dynamics simulations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 119223 ~ 119223
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2024.119223	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51件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 36件)

1. 発表者名 Yuelin WANG, Thanh Ngoc PHAM, Yoshitada Morikawa, Likai YAN
2. 発表標題 Density functional theory study on a nitrogen-rich carbon nitride material C ₃ N ₅ as photocatalyst for CO ₂ reduction to C ₁ and C ₂ products
3. 学会等名 The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Harry-Handoko Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Multi-scale simulations of equilibrium step fluctuations and Cu-Zn surface alloying on Cu(111)
3. 学会等名 The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Beatriz A. C. Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Insight into sintering resistance of Pd/Sr3Ti2O7 under the three-way catalyst atmosphere revealed by machine learning enhanced global optimization
3. 学会等名 The 12th International Conference on Environmental Catalysis(ICEC2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 The elucidation of Cu-Zn surface alloying on Cu(997) by machine learning molecular dynamics
3. 学会等名 The 12th International Conference on Environmental Catalysis(ICEC2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Theoretical Study of hydrogenation process of CO2 on metal catalysts
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 The elucidation of Cu-Zn surface alloying on Cu(997) by machine learning molecular dynamics
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Beatriz A. C. Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Origin of Sintering Resistance of Pd/Sr3Ti2O7 under the Three-way Catalyst atmosphere revealed by Machine Learning enhanced Global Optimization
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Beatriz Andrea Choi Tan, Ace Christian Feraren Serranon, Allan Abraham Bustria Padama, Ikutaro Hamada, Joey Duran Ocon, Yoshitada Morikawa, Takao Kotani
2. 発表標題 Magnetism and Semiconducting Behavior in Nickel Selenide
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Likai Yan, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Activity and selectivity of N ₂ fixation on B doped g-C ₃ N ₄ : A density functional theory study
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Thanh N Pham, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Density functional study of NO-H ₂ O coadsorption on Cu(111)
3. 学会等名 The 5th International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology (ICAMN 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Thanh N Pham, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Van der Waals density functional study of NO-H ₂ O coadsorption on Cu(111)
3. 学会等名 6th International Symposium on Frontiers in Materials Science (FSM2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Thanh N Pham, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Density functional theory study on NO-H ₂ O complex formation on Cu(111)
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Beatriz A. C. Tan, Malthe K. Bisho, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Bjork Hammer, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Metal-support interaction of Pd/Sr ₃ Ti ₂ O ₇ under the three-way catalyst atmosphere revealed by machine learning enhanced global optimization
3. 学会等名 ACS Spring 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 The Elucidation of Cu-Zn Surface Alloying by Machine Learning Molecular Dynamics
3. 学会等名 The 8th International Conference on Mathematics and Natural Sciences (ICMNS2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Muhammad Rifqi Al Fauzan, Thanh Ngoc Pham, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 NO Reduction Reaction on Cu catalyst
3. 学会等名 The 8th International Conference on Mathematics and Natural Sciences (ICMNS2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh Ngoc Pham, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 A density functional theory study on NO-H ₂ O co-adsorption on Cu(111)
3. 学会等名 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第14回 シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Harry Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of Cu-Zn Surface Alloy
3. 学会等名 2022関西薄膜・表面物理セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Harry Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO ₂ Hydrogenation to Formate on Cu(111) Surface
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 上田亮, Harry Handoko Halim, 森川良忠
2. 発表標題 機械学習分子動力学法によるCO吸着したCuステップ表面の再構成の解析
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Yoshitada Morikawa*, Likai Yan
2. 発表標題 N ₂ fixation on B doped g-C ₃ N ₄ : thermodynamic and kinetic analysis
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Harry Handoko HALIM, Yoshitada MORIKAWA
2. 発表標題 The Elucidation of Cu-Zn Surface Alloying on Cu(111) by Machine-Learning Molecular Dynamics
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2021年～2022年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Dry Reforming of Methane
3. 学会等名 Soedirman ' s International Conference on Mathematics and Applied Sciences (SICoMAS 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Theoretical Study on the Dry Reforming of Methane
3. 学会等名 6th International Conference on Catalysis and Chemical Engineering (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 Y. Wang , T. N.Pham , L. Yan and Y. Morikawa
2. 発表標題 Density functional theory on nitrogen (N) doped graphdiyne as electrocatalyst
3. 学会等名 ISSS-9 (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 S. E.M. Putra , Y. Morikawa, and I. Hamada
2. 発表標題 Nuclear Quantum Effect of Methane Adsorbed on Metal Surfaces
3. 学会等名 ISSS-9 (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 T. N. Pham , Y. Hamamoto , K. Inagaki , I. Hamada and Y. Morikawa
2. 発表標題 Role of intermolecular interactions in NO chemisorption on Cu(111)
3. 学会等名 ISSS-9 (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 H. H. Halim , S. E. M. Putra , F. Muttaqien , I. Hamada , K. Inagaki , Y. Hamamoto and Y. Morikawa
2. 発表標題 Multi-scale Simulation of Equilibrium Step Fluctuations on Cu(111) Surfaces
3. 学会等名 ISSS-9 (国際学会)
4. 発表年 2021年 ~ 2022年

1. 発表者名 Harry H. Halim, Septia E.M Putra, Fahdzi MuttaqienA, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Density Functional Kinetic Monte Carlo Simulation of Surface Step Fluctuation on the Cu(111) Surface
3. 学会等名 日本物理学会2020秋季大会
4. 発表年 2020年 ~ 2021年

1. 発表者名 Harry H. Halim and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine learning molecular dynamics simulation of vibration driven CO2 hydrogenation to formate on Cu(111) surface
3. 学会等名 2023年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Beatriz A. C. Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Metal-support interaction of Pd/Sr3Ti2O7 catalysts revealed by machine-learning enhanced global optimization and thermodynamics
3. 学会等名 第17回 物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Beatriz A. C. Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Metal-support interaction of Pd/Sr3Ti2O7 under the three-way catalyst atmosphere revealed by machine learning enhanced global optimization and first-principles thermodynamics
3. 学会等名 ISSPワークショップ「表面界面スペクトロスコピー2023」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine learning molecular dynamics simulation of vibration driven CO2 hydrogenation to formate on Cu(111) surface
3. 学会等名 ISSPワークショップ「表面界面スペクトロスコピー2023」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine learning molecular dynamics simulation of vibration driven CO2 hydrogenation to formate on Cu(111) surface
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Harry H. Halim, Likai Yan and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 DFT investigation on oxygen reduction reaction over nitrogen (N) doped graphdiyne as an electrocatalyst: the importance of preadsorbed OH* and solvation effect
3. 学会等名 ISSPワークショップ「表面界面スペクトロスコピー2023」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuelin WangA, Thanh Ngoc PhamA, Harry H. HalimA, Likai YanB and Yoshitada MorikawaA*
2. 発表標題 DFT investigation on oxygen reduction reaction over nitrogen (N) doped graphdiyne as an electrocatalyst: the importance of pre-adsorbed OH* and solvation effect
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Thanh Ngoc Pham, Beatriz Andrea Choi Tan, Yuji Hamamoto, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada, and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Elucidating thermal stability of Pd/Sr3Ti207 by machine learning enhanced global optimization and thermodynamics
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 John Isaac G. Enriquez, Harry Handoko Halim, Takahiro Yamasaki, Masato Michiuchi, Kouji Inagaki, Masaaki Geshi, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Temperature-driven Graphitization of the Diamond (111) and (100) Surfaces Studied by Graph Neural Network Molecular Dynamics
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry. H. Halim, Ryo Ueda, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO-driven Formation of Cu Clusters on Cu(111) Surface
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry. H. Halim, Ryo Ueda, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO-driven Formation of Cu Clusters on Cu(111) Surface
3. 学会等名 ACS Fall 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 John Isaac G. Enriquez, Harry Handoko Halim, Yamazaki Takahiro, Masato Michiuchi, Kouji Inagaki, Masaaki Geshi, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Oxidation and Graphitization of the Diamond (111) and (100) Surfaces Studied by Graph Neural Network Molecular Dynamics
3. 学会等名 The 33rd edition of the International Conference on Diamond and Carbon Materials (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 First-principles and machine-learning study of interface chemical reactions for energy and environmental problems
3. 学会等名 The 4th International Workshop on Advanced Materials and Devices 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, and Y. Morikawa
2. 発表標題 Elucidation of reaction mechanisms in NOx purification catalysts using first-principle calculations
3. 学会等名 The 4th International Workshop on Advanced Materials and Devices 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 First-principles and machine-learning study of interface chemical reactions for energy and environmental problems
3. 学会等名 European Conference on Surface Science 36 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Thanh N. Pham, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, and Y. Morikawa
2. 発表標題 Elucidation of reaction mechanisms in NOx purification catalysts using first-principle calculations
3. 学会等名 Asian Computational Materials Design Workshop (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry Handoko Halim, Ryo Ueda, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO-driven Formation of Cu Clusters on Cu(111) Surface
3. 学会等名 Advanced Materials Research GRAND MEETING (MRM2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Harry H. Halim, Ryo Ueda, and Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Elucidation of Cu-Zn Surface Alloying and CO-induced Transformation of Cu Surface by Machine Learning Molecular Dynamics
3. 学会等名 ENERGY-X 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 John Isaac G. Enriquez, Harry Handoko Halim, Takahiro Yamasaki, Masato Michiuchi, Kouji Inagaki, Masaaki Geshi, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Graph Neural Network Molecular Dynamics Study of Thermal Degradation of Clean and Oxygen-terminated Diamond (111) and (100) Surfaces
3. 学会等名 Advanced Materials Research GRAND MEETING (MRM2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Theoretical Study of Hydrogenation Process of CO ₂ on Metal Catalysts
3. 学会等名 Surface Science Discussion 2023, Modern trends in surface science studies, online (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Hydrogenation process of CO ₂ on metal catalysts studied by combined first-principles and machine learning methods
3. 学会等名 Hydrogenation process of CO ₂ on metal catalysts studied by combined first-principles and machine learning methods, Da nang, Vietnam (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 First-principles and machine-learning study of interface chemical reactions for energy and environmental problems
3. 学会等名 The 4th International Workshop in Advanced Materials and Devices -IWAMD 2023, Thai Nguyen, Vietnam (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshitada Morikawa
2. 発表標題 Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO-driven Formation of Cu Clusters on a Cu(111) Surface
3. 学会等名 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>森川研ホームページ http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/#showalumnia 森川研究室・大阪大学 大学院工学研究科 http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/#</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
研究協力者	ファム ゴック タン (PHAM Ngoc Thanh)	大学院工学研究科・特任助教 (14401)	

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
研究協力者	ハリム ハリー ハンドコ (HALIM Harry Handoko)	大学院工学研究科・特任助教 (14401)	

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			
インドネシア	バンドン工科大学	スマトラ工科大学		
マレーシア	University Sains Malaysia			
フィリピン	De La Salle大学			
中国	東北師範大			