

令和 6 年 6 月 13 日現在

機関番号：13302

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03400

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Ab initio DMC-phonon calculations applied to layered materials

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） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：第一原理量子モンテカルロ法を用いたフォノン計算を実現する研究を実施した。「波動関数空間での位相構造を考慮した勾配算定」に着目してフォース算定を実現した。現実系層状物質を対象とした量子モンテカルロ計算を確立した。フォース算定の信頼性に大きな影響を与える要因として、擬ポテンシャルの局所近似の問題を浮き彫りとし、擬ポテンシャルの非局所型構成の根本に立ち戻り、L2型と呼ばれる新たな方法を提案・開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電子状態計算によるシミュレーション予見は、材料科学や生命科学に広く浸透した基盤分析手法となっている。従前の電子状態計算法では記述信頼性が確保できない対象は、往々にして革新的物性を担い、本研究の対象となる層状物質もその一例である。本研究は、従前手法を超える記述信頼性実現を目的としたもので、広く材料科学や生命科学に亘って、電子状態計算によるシミュレーション予見の適用対象を拡げるといふ波及をもたらす。

研究成果の概要（英文）：We conducted a study to realize phonon calculations using the ab initio quantum Monte Carlo method. Focusing on the derivative evaluation considering the phase of many-body wavefunction, we achieved force calculations. We established quantum Monte Carlo calculations for realistic layered materials. As a significant factor affecting the reliability of force calculations, we highlighted the issue of local approximation in pseudopotentials and returned to the fundamentals of constructing non-local pseudopotentials. We proposed and developed a new method for the construction of pseudopotentials called the L2-type pseudopotentials.

研究分野：物性理論

キーワード：第一原理 拡散モンテカルロ フォノン 層状物質 電子相関

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。

## 【1. 研究開始当初の背景】

物質の層状構造は、グラフェンや酸化物などで実現される新規物性の舞台であり、最近では構造材料においても力学的強度を実現する鍵と目されている[1]。これら物質に対する電子状態/格子振動解析は「有用な物性を引き出すための指針確立」に必須である。現行の普及法である密度汎関数法は、フォースなど「エネルギー微分量」の算定に長け、格子振動解析もよく普及し物性解析に供されている。密度汎関数法は、非共有性結合に対しては予見信頼性が困難をきたすため、層間結合が非共有性結合で支配される層状物質の場合、十分な解析予見を果たすことができない事が問題となっている[2]。

	層間相互作用記述	格子振動解析
密度汎関数法	△	○ (計算可能だが予見信頼性に難)
第一原理量子モンテカルロ法	◎	「X→◎」 (計算出来るようになれば確実な予見信頼性)
層状物質の解析での要求	○	○ (層間相互作用がキチンと考慮された格子振動解析が希求される)

図1/多彩な新奇物性を産む層状物質を対象とした第一原理シミュレーション解析では、非共有結合性の層間相互作用を適正に記述しつつ格子振動解析を行える枠組みが希求される。第一原理量子モンテカルロ法での格子振動解析は、**実現すれば結合の性質によらず高い記述性が期待される**。これを実現しようというのが**本研究の目的**である。

## 【2. 研究の目的】

応募者が主務とする第一原理量子モンテカルロ法は、最も信頼性の高い予見性と高い超並列性能から次世代の汎用第一原理計算手法と目されている[3]。非共有性結合で支配される物性記述にも長けており、ダイカルゴゲナイトなど層状物質に対する適用では、他手法で記述できない予見性を達成している[4]。しかし、エネルギーの2階微分算出で統計誤差がひどく使い物にならないという大きな問題[5]があり、**第一原理量子モンテカルロ法によるフォースや格子振動解析は未確立であった**(図1の'x'箇所)。微分勾配量を「エネルギー空間中の数値微分」と扱う長年行われてきたやり方に替え「波動関数空間での位相構造を考慮した勾配算定」に切り替えることで、統計誤差に著しい改善が見いだされることが**応募者により明らかになった**[8]。この手法の層状物質への適用が実現すれば、層間相互作用が考慮された予見性の高い格子振動解析を実現することが出来る(図1の'x→◎'箇所)。第一原理量子モンテカルロ法による微分量算定には、30年近くに亘る方法論開発の挑戦が続けられてきた(図2)。本研究が目的とするのは、その究極的ゴールともいえる格子振動計算(フォノン解析)の実現である。

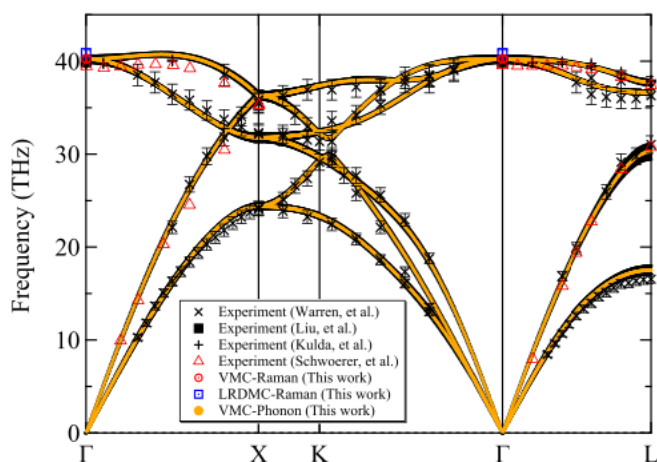


図2/ダイヤモンドに対するフォノン計算(申請者らによる原著論文成果[8])。第一原理量子モンテカルロ法では統計誤差が十分に絞られていないと理論予見としての意味を失うが、採用した方法により、**実用に耐える十分な統計精度**での予見を達成することができた。また、得られた結果が密度汎関数法の結果に一致しており、申請者らの実装したコードが正しいことも確認できている。

### 【3. 研究の方法】

長年の挑戦が「エネルギー数値微分の誤差軽減」を目指したものであった事に対し、我々は「波動関数空間での位相構造を考慮した自然勾配法」(統計科学におけるフィッシャー情報量に相当)に着目し、その実装によって著しい精度向上を実現する。格子振動解析(フォノン分散計算)の機能は、申請者グループが開発に携わっている第一原理量子モンテカルロ法のコード(**TurboRVB**)[6]に実装する。本研究では、ワープ変換/自動微分による力の計算[7]と数値微分(フローズンフォノン法)を組み合わせ、**実用的な統計精度**でフォノン分散を計算する機能を実装する。先行研究で考案されたフォノン計算の枠組みは統計誤差が大きく、結晶材料に対しては到底使い物にならなかったが、**申請者らが採用した方法**では自動微分を用いた事が功を奏して、図2に示すような実用的な統計精度で結晶材料のフォノン分散が計算可能であることが明らかになった。

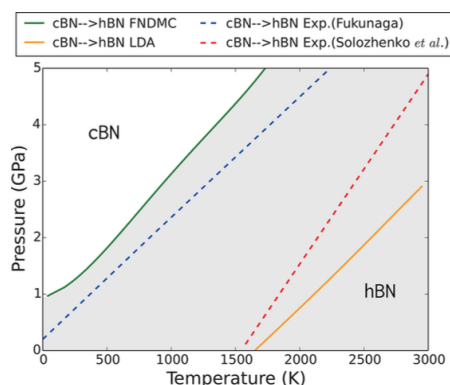


図3/現実系層状物質である窒化ホウ素を対象とした第一原理量子モンテカルロ計算(申請者らによる**原著論文成果**[9])。指定した圧力・温度において三次元結晶相(cBN)と層状結晶相(hBN)のいずれが安定に実現するかを示す相境界が図中に描かれている。実験(点線)・理論(実線)ともに相互に齟齬ある結論が報告されており、従前理論手法の予見信頼性限界もあり明確な結論が下せない基礎的な挑戦課題であった。本研究で予見信頼性を向上させた第一原理量子モンテカルロ法シミュレーション予見が可能となり(緑線)、実験事実の齟齬(2つの点線)を解消する結論が得られた。

### 【4. 研究成果】

初年度には「波動関数空間での位相構造を考慮した勾配算定」に着目してフォース算定の実用性を大きく高めるような業績(分担者中野・代表者前園ら[8]/図2)、および、現実系層状物質を対象とした量子モンテカルロ計算(分担者中野・分担者本郷、代表者前園ら[9]/図3)を確立させた。これら経験を通して、フォース算定の信頼性に大きな影響を与える要因として「擬ポテンシャルにかかる局所近似の問題」が浮き彫りとなり、後半年度中は特に、この問題に傾注して研究を推進した。擬ポテンシャルの非局所型構成の根本に立ち戻り、L2型と呼ばれる新たな方法を提案し、その開発と校正検証に取り組んだ。当該問題に対しての研究コミュニティの長年の取組み経緯の上に十分なインパクトを与えるような良好な結果が得られており、原著論文が出版された(分担者本郷、代表者前園ら[10]/図4)。

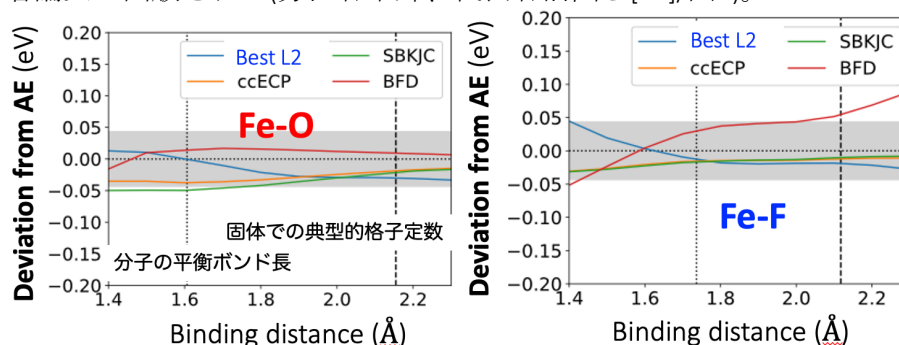


図4/新たに開発された第一原理量子モンテカルロ法用途の擬ポテンシャル(BestL2と表記されたもの)による遷移金属分子の乖離曲線。従前のもの(BFD, ccECP, SBKJC)に比べて、より誤差の少ない記述性が実現されている。

## 【参考文献】

- [1] K.Yamashita *et al.*, *J. Alloys Compd.*, 788 (2019) 277.
- [2] M. Ugeda *et al.*, *Nat. Phys.* 12, 92 (2016).
- [3] W.M.C. Foulkes *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* 73, 33 (2001).
- [4] E. Mostaani, (他 2 名), R. Maezono, (他 3 名), **Phys. Rev. B** 96, 075431 (2017). (**Top5%**)
- [5] J.R. Trail and R. Maezono, **J. Chem. Phys.** 133, 174120 (2010). (IF = 3.164)
- [6] K. Nakano *et al.*, **J. Chem. Phys.** 152, 204121 (2020/IF=2.997). (**Top10%**)
- [7] S. Sorella and L. Capriotti, *J. Chem. Phys.* 133, 234111 (2010).
- [8] K. Nakano, T. Morresi, M. Casula, R. Maezono, S. Sorella, *Phys. Rev. B* 103, L121110 (2021).
- [9] Y. Nikaido, T. Ichibha, K. Hongo, (他 3 名), R. Maezono, K. Nakano, *J. Phys. Chem. C* 126, 6000 (2022)
- [10] A. Raghav, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano, *J. Chem. Theory Comput.* 19, 2222 (2023).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計27件（うち査読付論文 27件 / うち国際共著 18件 / うちオープンアクセス 25件）

1. 著者名 Oqmhula Kenji, Toma Takahiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 8
2. 論文標題 First-Principles-Based Insight into Electrochemical Reactivity in a Cobalt-Carbonate-Hydroxide Pseudocapacitor	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 6743 ~ 6752
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c07362	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, Yano Masao, Kimoto Hiroyuki, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 6
2. 論文標題 Feature Space of XRD Patterns Constructed by an Autoencoder	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2200613 ~ 2200613
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202200613	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 Song P., Hou Z., Nakano K., Hongo K., Maezono R.	4. 巻 28
2. 論文標題 Potential high-Tc superconductivity in YCeH and LaCeH under pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Today Physics	6. 最初と最後の頁 100873 ~ 100873
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtphys.2022.100873	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 Irandegani Esmat, Maezono Ryo, Abbasnejad Mohaddeseh	4. 巻 132
2. 論文標題 Electronic and magnetic properties of pure and Cu doped non-polar ZnO (1010) surfaces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 173903 ~ 173903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0106799	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 Murono Takahiro, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 34
2. 論文標題 Ab-initio-based interface modeling and statistical analysis for estimate of the water contact angle on a metallic Cu(111) surface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Surfaces and Interfaces	6. 最初と最後の頁 102342 ~ 102342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.surfin.2022.102342	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 Masubuchi Yuji, Miyazaki Suzuka, Song Peng, Yamamoto Takafumi, Nakano Kosuke, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 918
2. 論文標題 High-pressure behavior of tetragonal barium carbodiimide, BaNCN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 165632 ~ 165632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.165632	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 Oka Kengo, Ichibha Tom, Kato Daichi, Noda Yasuto, Tominaga Yusuke, Yamada Kosei, Iwasaki Mitsunobu, Noma Naoki, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Reboredo Fernando A.	4. 巻 51
2. 論文標題 Anionic order in Pb2Ti4O9F2 Revisited by nuclear magnetic resonance and density functional theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 15361 ~ 15369
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2DT00839D	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, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 214
2. 論文標題 Electronic structure and effective mass analysis of doped TiO2 (anatase) systems using DFT+U	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111714 ~ 111714
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2022.111714	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 Qian Yixiao, Song Bin, Jin Junteng, Prayogo Genki I., Utimula Keishu, Nakano Kousuke, Maezono Ryo, Hongo Kenta, Zhao Gaoling	4. 巻 105
2. 論文標題 Ab initio molecular dynamics simulation of structural and elastic properties of SiO <sub>2</sub> -P2O <sub>5</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> glass	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 6604 ~ 6615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.18614	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 Prayogo Genki Imam, Tirelli Andrea, Utimula Keishu, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Nakano Kousuke	4. 巻 62
2. 論文標題 Shry: Application of Canonical Augmentation to the Atomic Substitution Problem	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 2909 ~ 2915
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.2c00389	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 Yoshimoto Yuki, Toma Takahiro, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 14
2. 論文標題 Computational Design to Suppress Thermal Runaway of Li-Ion Batteries via Atomic Substitutions to Cathode Materials	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 23355 ~ 23363
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.2c01607	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, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 126
2. 論文標題 Impact of Surface Faceting on Gas Sensing Selectivity of NiO: Revealing the Adsorption Sites of Organic Vapors on the {111} Facet	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8037 ~ 8046
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c00092	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 Morgan Emily E., Evans Hayden A., Pilar Kartik, Brown Craig M., Clement Raphaelle J., Maezono Ryo, Seshadri Ram, Monserrat Bartomeu, Cheetham Anthony K.	4. 巻 34
2. 論文標題 Anharmonic Behavior in the NASICON NaZr <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Electrolyte Revealed from Temperature-Dependent Neutron, NMR, and Ab Initio	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 4029 ~ 4038
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.2c00212	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 Zhong Xianzhu, Nag Aniruddha, Zhou Jiabei, Takada Kenji, Amat Yusof Fitri Adila, Mitsumata Tetsu, Oqmhula Kenji, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Kaneko Tatsuo	4. 巻 12
2. 論文標題 Stepwise copolymerization of polybenzimidazole for a low dielectric constant and ultrahigh heat resistance	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 11885 ~ 11895
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RA01488B	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, Neufeld Verena A., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Thom Alex J. W.	4. 巻 105
2. 論文標題 Making the most of data: quantum Monte Carlo post-analysis revisited	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 045313:1 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.105.045313	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, Ichibha Tom, Hongo Kenta, Reboredo Fernando A., Kumar K. C. Hari, Mahadevan Priya, Maezono Ryo, Nakano Kousuke	4. 巻 126
2. 論文標題 Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 6000 ~ 6007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10943	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 Dahule Rohit, Singh Chetan C., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 10
2. 論文標題 Anomalies in the bulk and surface electronic properties of SnS: effects of native defects	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5514 ~ 5525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TC04738H	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 Song Peng, Hou Zhufeng, Baptista de Castro Pedro, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo	4. 巻 126
2. 論文標題 High-Pressure Mg-Sc-H Phase Diagram and Its Superconductivity from First-Principles Calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2747 ~ 2755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08743	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, Yadav Amit Kumar Singh, Ichibha Tom, Maezono Ryo, Nakano Kousuke, Hongo Kenta	4. 巻 24
2. 論文標題 Diffusion Monte Carlo evaluation of disiloxane linearisation barrier	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3761 ~ 3769
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP01471D	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 Song Peng, Hou Zhufeng, de Castro Pedro Baptista, Nakano Kousuke, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 5
2. 論文標題 The Systematic Study on the Stability and Superconductivity of Y Mg H Compounds under High Pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2100364:1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202100364	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, Zhang Yunwei, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Reboredo Fernando A.	4. 巻 104
2. 論文標題 Candidate structure for the H2-PRE phase of solid hydrogen	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214111:1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.214111	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 Song Peng, Hou Zhufeng, Castro Pedro Baptista de, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo	4. 巻 33
2. 論文標題 High Tc Superconducting Hydrides Formed by LaH24 and YH24 Cage Structures as Basic Blocks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 9501 ~ 9507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c02371	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 Kitagawa Yuuki, Ueda Jumpei, Fujii Kotaro, Yashima Masatomo, Funahashi Shiro, Nakanishi Takayuki, Takeda Takashi, Hirotsuki Naoto, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Tanabe Setsuhisa	4. 巻 33
2. 論文標題 Site-Selective Eu3+ Luminescence in the Monoclinic Phase of YSiO2N	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 8873 ~ 8885
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c03139	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 Prayogo Genki I., Shin Hyeondeok, Benali Anouar, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 6
2. 論文標題 Importance of Van der Waals Interactions in Hydrogen Adsorption on a Silicon-carbide Nanotube Revisited with vdW-DFT and Quantum Monte Carlo	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 24630 ~ 24636
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c03318	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 Zhang Jiaqi, Ishizuka Keisuke, Tomitori Masahiko, Arai Toyoko, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Tosatti Erio, Oshima Yoshifumi	4. 巻 21
2. 論文標題 Peculiar Atomic Bond Nature in Platinum Monatomic Chains	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 3922 ~ 3928
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.1c00564	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 Yoshio Satoshi, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 125
2. 論文標題 High-Throughput Evaluation of Discharge Profiles of Nickel Substitution in LiNiO2 by Ab Initio Calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14517 ~ 14524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c11589	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 Dahule Rohit, Raghav Abhishek, Hanindriyo Adie Tri, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 4
2. 論文標題 Surface Study of CuSnS3 Using First Principles Density Functional Theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2000315:1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202000315	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39件 (うち招待講演 9件 / うち国際学会 18件)

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 オートエンコーダ技術によるXRDピークのレレバンシ同定
3. 学会等名 2023年応用物理学会春季講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Efficient generation of doped crystal structure model by combinatorial mathematics Computational Design
3. 学会等名 APS March Meeting2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Deep-learning technique to recognize XRD peak patterns
3. 学会等名 Department seminar, International Center for Computational Method and Software, College of Physics, Jilin University (China) (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 遺伝的アルゴリズムによる三元水素化物超伝導体の構造探索
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～2023年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Data scientific recognition of X-ray diffraction patterns
3. 学会等名 International Conference on Polymers and Environments, Auditorium, K building, VISTEC (Vidyasirimedhi Institute of Science and Technology)
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 固体水素高压相のデータ科学的構造探査と第一原理量子モンテカルロ法
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 New efficient algorithm to generate doped crystal structure model used for ab initio simulations using modern combinatorial mathematics
3. 学会等名 Department seminar, International Center for Computational Method and Software, College of Physics, Jilin University (China) (招待講演)
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Auto-encoder technique to identify relevant peaks in spectroscopy
3. 学会等名 ACS Spring Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Oqmhula, K. Hongo, R. Maezono, T. Ichibha
2. 発表標題 Ab initio binding energy evaluation of cyclodextrin-drug inclusion complexes
3. 学会等名 ACS Spring Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 G. I. Prayogo, H. Shin, A. Benali, R. Maezono, K. Hongo
2. 発表標題 Importance of Van der Waals interactions in hydrogen adsorption on a silicon-carbide nanotube revisited with vdW-DFT and quantum Monte Carlo
3. 学会等名 ACS Spring Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Raghav, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano
2. 発表標題 Benchmark calculations for binding energies of the "G2 set" of molecules using TurboRVB quantum Monte Carlo package
3. 学会等名 ACS Spring Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Hongo
2. 発表標題 First-principles modeling of water-metal wettability
3. 学会等名 ACS Spring Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 前園涼
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り扱い
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Sou, K. Nakano, R. Maezono, K. Hongo
2. 発表標題 The systematic study on the stability and superconductivity of Y-Mg-H compounds under high pressure
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Raghav, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano
2. 発表標題 Ab initio binding energy calculations for molecules in the G2 set: Towards chemical accuracy by the Jastrow correlated Antisymmetrized Geminal Power (JAGP)
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 G. I. Prayogo, A. Tirelli, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono, K. Nakano
2. 発表標題 Application of canonical augmentation to the atomic substitution problem
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 奥村健司, 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-薬剤包接体の第一原理精密結合エネルギー評価
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 データ駆動型アプローチによるXRD解析：磁性合金系への応用
3. 学会等名 2022年第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 奥村健司, 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-薬剤包接系の第一原理結合エネルギー評価
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 G. I. Prayogo, A. Tirelli, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono, K. Nakano
2. 発表標題 Application of canonical augmentation to disordered crystal structure generation
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宋鵬, 中野晃佑, 本郷研太, 前園涼
2. 発表標題 クラスレート型カゴ状構造を持つ三元水素化物高温超伝導体
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(2022年)
4. 発表年 2022年



1 . 発表者名 A. Raghav, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano
2 . 発表標題 Benchmark binding energy calculations for molecules in the G2 set: Towards chemical accuracy by the Jastrow correlated Antisymmetrized Geminal Po (JAGP)
3 . 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(2022年)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 R. Maezono
2 . 発表標題 Quantum annealing applied to ionic diffusion in solids
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 K. Oqmhula, K. Hongo, R. Maezono, T. Ichibha
2 . 発表標題 First principles binding energy evaluation of host-guest inclusion comple
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 G. I. Prayogo, H. Shin, A. Benali, R. Maezono, K. Hongo
2 . 発表標題 Quantum Monte Carlo study on Van der Waals interactions in hydrogen adsorption on a silicon-carbide nanotube
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 A. Raghav, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano
2 . 発表標題 Benchmark all-electron ab initio quantum Monte Carlo calculations with Antisymmetrized Geminal Power (AGP) and Pfaffian Ansatz for G2-set molecules using TurboRVB package
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online ( 国際学会 )
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 Y. Nikaidou, T. Ichiba, K. Hongo, F. A Reboredo, R. Maezono, K. Nakano
2 . 発表標題 Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online ( 国際学会 )
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 K. Hongo
2 . 発表標題 Autoencoder-based feature space of XRD peak patterns
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online ( 国際学会 )
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 K. Nakano
2 . 発表標題 Space warp coordinate transformation for efficient ionic force calculations in quantum Monte Carlo
3 . 学会等名 APS March Meeting 2022,online ( 国際学会 )
4 . 発表年 2022年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 組合せ論アルゴリズムによる固溶体構造モデル生成ツール「SHRY」
3. 学会等名 公益社団法人日本セラミックス協会 2022年年会, オンライン
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 機械学習によるXRDパターン認識
3. 学会等名 公益社団法人日本セラミックス協会 2022年年会, オンライン
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Machine learning technique applied to X-ray diffraction patterns
3. 学会等名 PACIFICHEM 2021, online (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Nakano
2. 発表標題 Turbo-Genius: A python-based workflow system for quantum Monte Carlo package
3. 学会等名 PACIFICHEM 2021, online (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Nakano
2. 発表標題 Recent progress in the ab-initio quantum Monte Carlo code, TurboRVB
3. 学会等名 The 24th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE24) (招待講演) (国際学会)
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基礎とニューラルネットワーク・量子アニーリングの活用技術
3. 学会等名 日本テクノセンター オンラインセミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Recognizing relevant peaks in spectroscopy; an application of auto-encoder
3. 学会等名 Japan-Taiwan joint workshop on materials science (Online) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 前園涼
2. 発表標題 適用例から学ぶマテリアルズ・インフォマティクス研究のおさえどころ
3. 学会等名 情報機構4月開催セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中野晃佑
2. 発表標題 第一原理量子モンテカルロ計算コード「TurboRVB」の開発概況と応用事例
3. 学会等名 東京大学 物性研究所 物質設計評価施設(MDCL)セミナー(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Maezono
2. 発表標題 Kohn-Sham equation
3. 学会等名 6th African School on Electronic Structure Methods and Applications (ASESMA-2021), Online(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 固溶限界算出法、固溶限界算出装置、固溶限界算出システム、プログラム	発明者 吉田智大、前園涼、 本郷研太	権利者 住友金属鉱山、 北陸先端科学技 術大学院大学
産業財産権の種類、番号 特許、特願2022-102240	出願年 2022年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔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
研究分担者	本郷 研太  (Hongo Kenta)  (60405040)	北陸先端科学技術大学院大学・情報社会基盤研究センター・准教授    (13302)	
研究分担者	中野 晃佑  (Nakano Kousuke)  (50870903)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・統合型材料開発・情報基盤部門・独立研究者    (82108)	

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