

令和6年度高性能汎用計算機高度利用事業

「富岳」成果創出加速プログラム

「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現」

成果報告書

令和7年5月30日

国立研究開発法人理化学研究所

中嶋 隆人

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現

体系的番号： JPMXP1020210317

1. 補助事業の目的

「富岳」を活用したハイパフォーマンス材料シミュレーション・インフォマティクスを中核として、世界を牽引する実験グループ・企業組合と連携した革新的な光エネルギー変換材料の社会実装を行う。創出されるデータに基づき、光触媒による水素製造・ウィルス不活性化による感染症対策・高効率な太陽電池の産業レベルでの実現を目指す。

2. 令和6年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和6年度）の事業実施計画

サブテーマA：革新的な水素製造光触媒の実現

(1) これまで行って来た SrTiO_3 と $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ の欠陥・ドーピングに対する「富岳」での第一原理計算を進展させ実験グループとの連携により光触媒の一層の高効率化を実現する。半導体光触媒の試作・評価を行い、その結果を反映した材料の見直しを行う。酸窒化物についても新奇な可視光応答光触媒の探索を行う。

(2) 可視光応答型光触媒用材料のバーチャルスクリーニングを実施し、その結果をもとにサイバー・フィジカルループを用いて有望材料を探索する。ここでは、令和5年度に発見したドーピングによる水素生成活性の向上メカニズムをコドープや元素置換による他元素系に展開し、データ同化の活用により探索範囲を拡張した探索を行う。さらに、有望材料に対して、令和5年度に構築した酸素欠陥の形成エネルギーと水素生成活性の物性予測AIによる合成プロセスの最適化を行うことで高効率化を目指す。

(3) 令和5年度に引き続き、光誘起キャリアの拡散定数の第一原理計算により新規材料設計された水分解光触媒の光誘起キャリアダイナミクスを解析することで高効率な光触媒活性の実現に必要な条件を実験Gに提案する。

サブテーマB：光触媒による感染症対策

(1) 高付加価値を持った光触媒設計のため、バナジン酸ビスマスと酸化スズヘマタイトの複合酸化物の表面計算を「富岳」にて継続して行い、酸素発生、過酸化水素発生、OHラジカル発生の異なる主生成物に対する触媒条件を明らかにし、高付加価値を持った光触媒の実証を実験グループと連携して行う。半導体光触媒の試作・評価を行うと共に、光触媒の見直しを行う。

(2) 令和5年度に引き続き、感染症ウィルスのエンベロープを構成する脂質、タンパク質、糖タンパク質の酸化チタン光触媒露出表面への吸着と分解機構について「富岳」とNTChemを用いた大規模量子化学計算により解明する。

サブテーマC：高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計

(1) 太陽電池DB構築に向けて、ペロブスカイト太陽電池の二重ペロブスカイト候補材料 $A(1-x)A'_xB(1-y)B'_yX(3-z)X'_z$ のハイスループット・シミュレーションを「富岳」にて継続する。Bサイトアニオンの典型的な酸化数から電荷中性になると考えられる200万構造について5ノード時間の計算を行い、合計で1,000万ノード時間程度を使用する予定である。あわせて、令和5年度に開発した太陽電池データベース公開のためのWebインターフェースを高度化する。

(2) 非鉛SnGeペロブスカイト太陽電池材料の劣化過程の解明に向けて、「富岳」とNTChemを用いた大規模量子化学シミュレーションにより欠陥等の粒界構造に対して電子状態を解析する。

(3) 令和5年度に実施したサイバー・フィジカルシステムによるSn・Ge系ペロブスカイト太陽電池材料推測に対しサイバー・フィジカルサイクルを繰り返すことで推測精度を高め、高効率かつ高耐久なSn・Ge系ペロブスカイト太陽電池を実証する。その際に上記の令和6年度計画(C2)で実施するNTChemによる粒界構造の情報も含めることができるようにサイバー・フィジカルサイクルを高度化する。また、別のペロブスカイト太陽電池材料に対するサイバー・フィジカルシステムによる新材料提案にも取り組む。

成果報告会もしくはシンポジウム開催予定等

(1) 年度末に当課題の公開シンポジウムを開催。

(2) International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2025)を令和7年1月ごろに開催。

2-2. 実施内容（成果）

(1) サブテーマA：革新的な水素製造光触媒の実現

(A1) 今年度は、ペロブスカイト型光触媒 $SrTiO_3$ (STO) と層状ペロブスカイト光触媒 $Y_2Ti_2O_5S_2$ (YTOS)の欠陥・ドーピングに対する「富岳」での第一原理計算をさらに発展させ実験グループとの連携により光触媒の一層の高効率化を実現した。

STO については、昨年度までにスーパーセルを用いた 2 価と 3 価のドーパント Mg、Ni、Zn、B、Al、Ga、In、Tl、Sc の詳細な解析を行なうことで、酸素欠陥によって現れる伝導帯直下の欠陥準位を抑制する効果があることが分かった。今年度は、欠陥とそれに対するカチオンドープの効果を見積もるために、複数の相平衡条件を用いたドーピングの生成

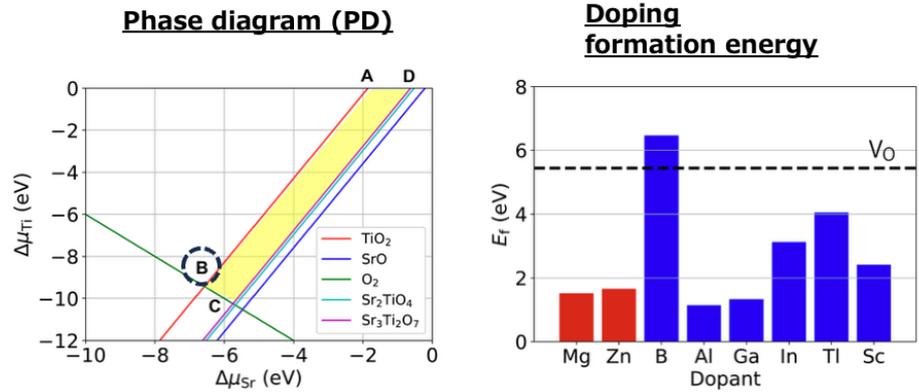


図 1. ドーピング生成エネルギーの計算に用いた相平衡条件 (左) と結果 (右)

エネルギーに対し VASP を用いて計算した。結果は図 1 に示す通りであり、触媒性能の向上が確認された Mg と Zn のドーピングは酸素欠陥状態 (V_0) よりも安定である結果が得られ、酸素欠陥と 2 価カチオンが対をなす効果があることが示された。実験からも触媒活性の向上を示すことができ、これらの結果を合わせて論文とし J. Phys. Chem. Lett. 誌に発表した。

以上の試作された STO は紫外光吸収であるが、可視光領域にも吸収帯を持つペロブスカイト酸窒化物 $ATaO_2N$ ($A=Ca, Sr, Ba$) とペロブスカイト酸化物 $PbTiO_3$ (PTO) についても計算を進めた。ここでは PTO の結果について記載する。PTO は c 軸 (4.158 Å) が a 軸 b 軸 (3.904 Å) よりも長い構造を持ち、内部に電位勾配を持つ特性がある。HSEsol 汎関数によるバンドギャップは

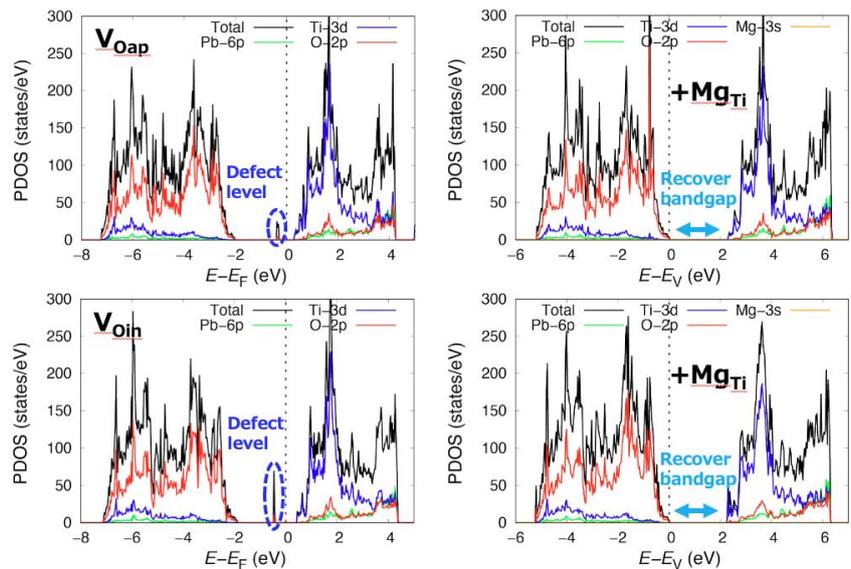


図 2. 酸素欠陥を含む PTO と Mg ドープした場合の部分状態密度

2.84 eV であり、実験値の 2.78 eV をよく再現する。酸素欠陥とドーピングには $3 \times 3 \times 3$ のスーパーセルを用いたが、結晶の異方性のために、チタンと隣接する酸素欠陥の相対位置には ap と in の 2 通りの組み合わせがある。一例として、酸素欠陥を含む PTO と酸素欠陥に隣接する Ti を Mg に置換した PTO の部分状態密度を図 2 に示す。STO の場合は Ti の 3d 軌道からなる欠陥準位は伝導帯直下であったが、それよりも若干深い位置に欠陥準位が現れることが示された。一方、4 価の Ti を 2 価の Mg で置換した場合には欠陥準位が現れず、STO と同様に酸素欠陥による電荷再結合が抑制されることが示唆された。PTO の 2 価ドープ材料については、今後、実験的な検証を行う予定である。可視光応答光触媒である YTOS についても昨年度と同様の解析を継続して行った。

(A2) 可視光応答型光触媒材料のバーチャルスクリーニングを実施し、その結果をもとにサイバー・フィジカルループを用いて有望材料を探索した。まず、理論的發展として、水素生成活性の向上が見られた 2 価カチオンをドーピングした STO を取り扱うために、令和 5 年度に構築した酸素欠陥の形成エネルギーの第一原理計算値を元にしたデータ同化 AI に対して、さらに「富岳」で計算したドーピング系の第一原理計算値を与えることで、焼成プロセスシミュレーションの探索範囲を拡張し、水素生成活性の予測 AI に元素置換の効果を実

装した。この焼成プロセスシミュレーションでは、動的モンテカルロシミュレーションを活用しており、令和 5 年度までに生成される純粋な目的物質生成量、酸素欠陥を含む目的物質生成量の特徴量化が行えるようになって

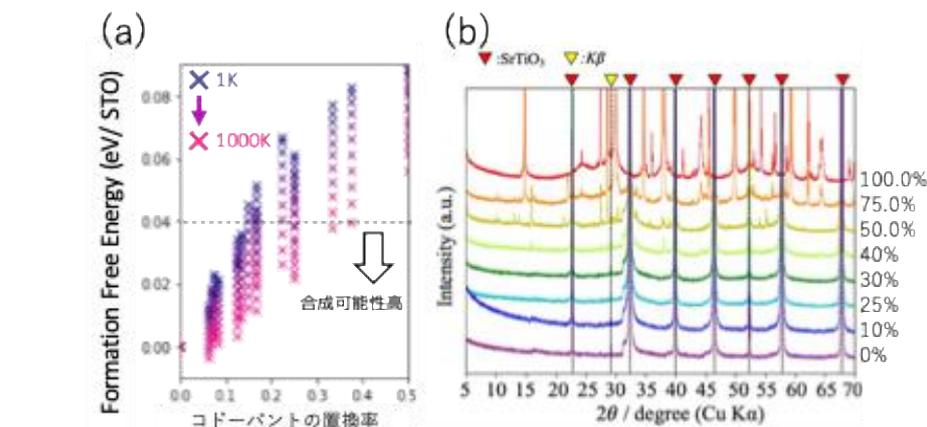


図 3. STO に対するコドー限界の推定 (a) 理論的解析：元素置換の形成自由エネルギー計算 (b) 実験的解析、合成材料に対する XRD 分析

いたが、さらに、ドーパント原子を含む目的物質生成量追加し、元素置換による水素生成活性の寄与も考慮できるようにした。これにより、水素生成活性の向上メカニズムをコドーピングや元素置換による他元素系に展開でき、仮想的なベンチマークデータに対する数値検証として 2 価カチオンドーピングした STO の水素生成活性の予測 AI の動作を確認できた。ドーピングの形成エネルギー計算においては、ドーパント原子の添加量および配座選択が重要であり、エントロピー効果を Wang-Landau 法によって取り込むことで、STO に対する実験的なコドーパントの固溶限界の説明に成功した (ENEOS 社と共同実施)。図 3 に示した理論的解析と実験的解析を比較することで、約 40% のコドー率であることがわかった。

さらに、可視光応答型光触媒用材料の探索においてはコドーピング (Cu、Fe、Ni、Pb) x (Cl、Br、Al、In、Li、Fe、Ni) および助触媒 (Pt、Ru、Rh、Pd、Ir) を条件とするバーチャルスクリーニングを実施した結果、新規の 4 元素系の可視光応答型光触媒材料

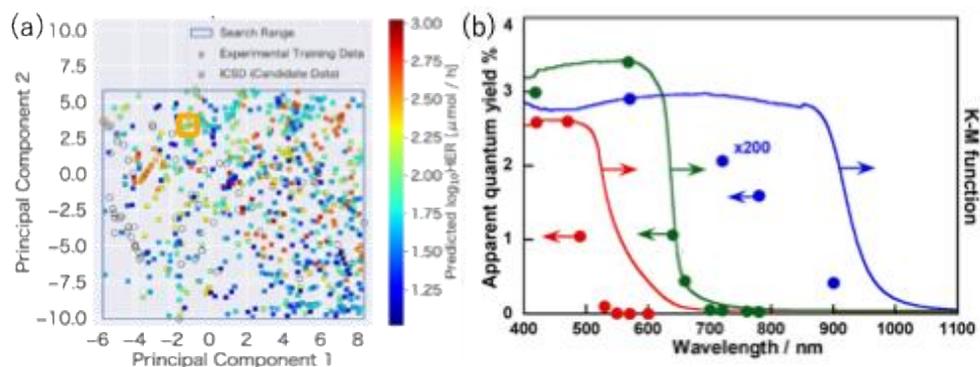


図 4. (a) コドーピングおよび助触媒の効果を含んだ AI によるバーチャルスクリーニング (b) 新規に見出した可視光応答型光触媒用材料の光応答実験

を見出し、Hydrogen Evolution Reaction Rate が予測値 $251 \mu\text{molh}^{-1}$ に対して実測値 $372 \mu\text{molh}^{-1}$ と実

証できた (図 4)。さらに、本 AI によるバーチャルスクリーニングを 6 元素系に探索範囲を拡張することで、 $581 \mu\text{molh}^{-1}$ の新規材料の発見に至った (光触媒材料の合成と評価は東京理科大学工藤研究室により実施、共著論文執筆中)。本プロジェクトによる AI と実験のサイバー・フィジカルループによって AI 予測が高精度化されることも確認しており、現在、さらなる新規の可視光応答型光触媒用材料の探索を継続している。

(A3) 令和 5 年度に引き続き、水分解光触媒材料として期待されているランタノイド系酸硫化物光触媒 $\text{Ln}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ ($\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$) について、光触媒量子効率に直接影響を与える光生成キャリアの移動度をフレリッヒ・ポーラロンモデルに基づく第一原理計算を「富岳」で Quantum Espresso を使って実施することで予測した。光生成キャリアは縦型光学フォノンと相互作用しフレリッヒ・ポーラロンを形成し、コヒーレント伝導する。移動度はフレリッヒ結合定数 α_F を用いて経路積分法により数値的に計算した。この計算に必要な物理量である光学誘電率 (ϵ_∞)、静止誘電率 (ϵ_0)、バンド有効質量 (m_e, m_h)、縦型光学 (LO) フォノンの振動数 ($\hbar\omega$) は第一原理計算 (DFT/PBE) により求めた (図 5)。表 1 に電子ポーラロンと正孔ポーラロンのフレリッヒ結合定数と移動度を示す。 $\text{Ln}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ ($\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$) のキャリア移動度はほぼ同様の挙動が予測されたが、電子ポーラロンと正孔ポーラロンの移動度のバランスが良くなかった。Gd については電子、正孔ポーラロンともに $20.6, 20.9 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ のバランスのとれた高い移動度が予測され、移動度の観点からは $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ が最適な水分解光触媒と評価し、実験連携グループである堂免グループに提案した。

表 1. フレリッヒ・ポーラロンモデルによる移動度 μ_K
電子ポーラロン (上段)、正孔ポーラロン (下段)

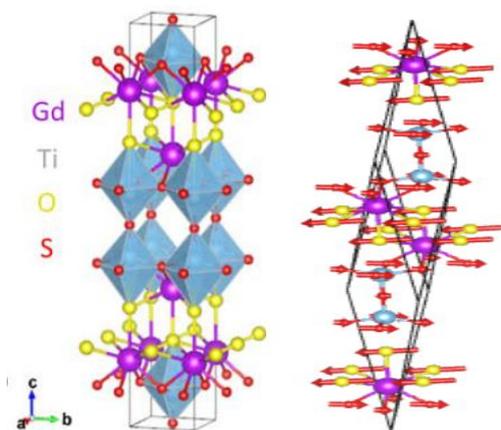


図 5. $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ の構造と LO (Eu) モード
(204.0 cm^{-1})

	ϵ_∞ (optical)	ϵ_0 (static)	m_e	m_h	$\hbar\omega$ (cm^{-1})	α_F	μ_K ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)
<u>Pr</u> $4f^36s^2$	6.85	21.5	0.582	0.508	49.0	3.59	32.6
						3.36	41.7
<u>Nd</u> $4f^46s^2$	6.85	162.6	0.580	0.519	89.1	3.73	16.6
						3.54	20.6
<u>Sm</u> $4f^66s^2$	6.84	65.5	0.577	0.552	117.6	3.04	19.2
						2.97	20.9
<u>Gd</u> $4f^75d^16s^2$	6.85	49.6	0.577	0.581	125.4	2.83	20.9
						2.84	20.6
<u>Tb</u> $4f^96s^2$	6.85	45.6	0.576	0.599	128.9	2.75	21.5
						2.80	20.0
<u>Dy</u> $4f^{10}6s^2$	6.95	43.2	0.576	0.617	129.9	2.66	22.7
						2.76	19.9
<u>Ho</u> $4f^{11}6s^2$	6.84	41.2	0.575	0.640	130.5	2.68	22.4
						2.83	18.3
<u>Er</u> $4f^{12}6s^2$	6.85	39.2	0.576	0.655	130.8	2.65	22.7
						2.83	17.9

(2) サブテーマB：光触媒による感染症対策

(B1) 高付加価値を持った光触媒設計のため、バナジン酸ビスマスと酸化スズーヘマタイトの複合酸化物の表面計算を「富岳」にて継続して行った。酸素発生、過酸化水素発生、OH ラジカル発生の異なる主生

成物に対する触媒条件は OH の吸着エネルギーによって変化し、酸素欠陥を伴う表面偏析した酸化スズが過酸化水素発生を効率よく行うことが計算で確認されたが、この表面状態については実験グループがラマン分光による構造の確認を実施し、それに基づく半導体光触媒の見直しを行なっている。

さらに今年度は、付加価値の高い光触媒の開発の一環として、エチレングリコールの酸化反応に対し、ヘマタイトにニッケル酸化物とコバルト酸化物を助触媒として用いる反応についての研究を進めた。8%のチタンをドーピングしたヘマタイトにおけるエチレングリコール水溶液中での電極反応では、コバルト酸化物では水の酸化反応が選択的に進むのに対し、ニッケル酸化物ではエチレングリコールの酸化反応が優位になることが実験的に示されている。鉄-ニッケルと鉄-コバルトの複合酸化物のモデル化を実施し、水とエチレングリコールそれぞれとの反応に対する中間体の密度汎関数計算を行った。準備的な結果として、コバルト酸化物では水と金属酸化物の吸着状態が安定であるために、エチレングリコールとの反応が阻害されることが示唆された。

(B2) 光触媒表面に対する効率の良い量子化学計算を実現するため、最適なクラスターモデルを構築する擬水素終端法を開発し、NTChem に実装した。擬水素原子で終端し、それらの電荷を最適化することにより光触媒酸化チタン露出(110)表面のクラスターモデル化に成功した (図 6 左)。バンドギャップは 2.4 eV、また価電帯トップは吸着グリシン分子の HOMO より低く得られた (図 6 右)。従来の表面近傍の水の酸化により生成する OH ラジカルによるウィルス分解反応機構ではなく、光照射により生成する酸化チタン表面の正孔直接注入によるウィルスの光触媒酸化反応過程のシミュレーションが可能となった。NTChem に実装されている TDDFT 法を用いた非断熱 ab initio 分子動力学計算手法により、ウィルスの光触媒分解反応の機構解明の準備計算を実施した。2025 年度に「富岳」を利用した本格計算を実施する予定である。

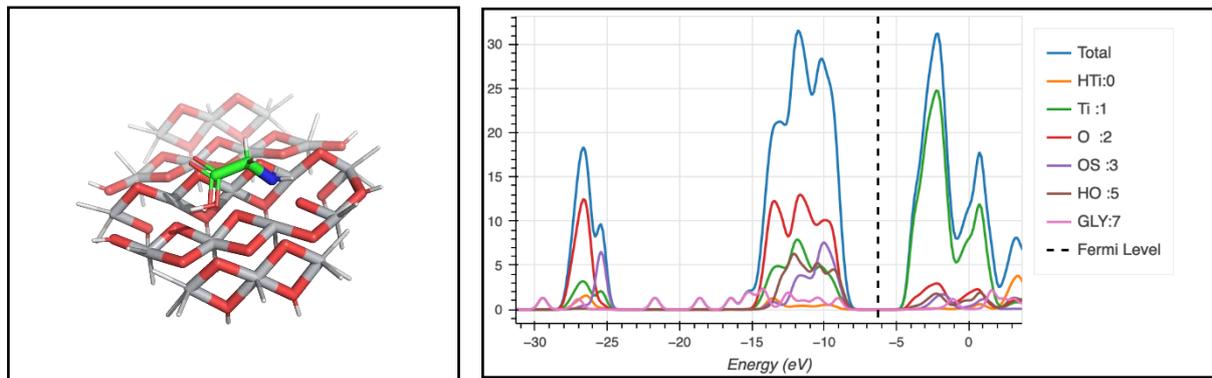


図 6. グリシン分子吸着した擬水素原子で終端した TiO₂(110)表面クラスター (左)、グリシン分子吸着した TiO₂(110)表面状態密度 (右)

サブテーマC：高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計

(C1) ペロブスカイト太陽電池材料の候補材料として考えられる $A_{4-x}A'_x B_{4-y}B'_y X_{12-z}X'_z$ (A: 5種, B: 49

種, X : 3種, $x = 0, 1, 2$, $y = 0, 1, 2$, $z = x + 2y$) の組成を持つ材料に対し、「富岳」による第一原理材料計算に基づいたハイスループット・シミュレーションを実施し、安定構造、全エネルギー、直接遷移ギャップ、間接遷移ギャップ、価電子帯上端と伝導帯下端の位置、電子・正孔有効質量などの物性情報のデータベース化を継続した。今年度は特に、サイバー・フィジカルシステムを活用した早期のデータベース利用に向けて、これまでのわれわれの研究から候補化合物として重要であると考えられるBサイトの組合せ14族-14族、13族-15族、9族-13族、11族-11族、11族-13族、11族-15族、9族-11族の化合物を中心に「富岳」でのハイスループット・シミュレーションを実施した。この際、「富岳」におけるハイスループット・シミュレーションの効率を向上させるため、構造データの計算状態の管理からジョブの投入までを一貫して行える計算スクリプトを高度化した。これにより、計算途中でエラーが発生した場合でも、条件変更と再実行を簡略化し、重複を防止する機能による安全かつ確実な再投入が可能となる。また、「富岳」の計算資源を効率良く利用するため、一つのジョブに複数の構造を割り当て、ジョブ内で確保したノードに順次構造を割り当てていくことで、計算ノードの空き時間を削減できるようにした。今後、今年度構築したデータベースを利用したサイバー・フィジカルシステムにより新規非鉛化ペロブスカイト材料を提案し実証する予定である。また、構築したデータベースを多くの企業・実験ユーザーに利用してもらうことで社会実装するため、2026年度中の公開を予定しており、このために昨年度から開発を進めているWEBインターフェースを高度化した(図7)。

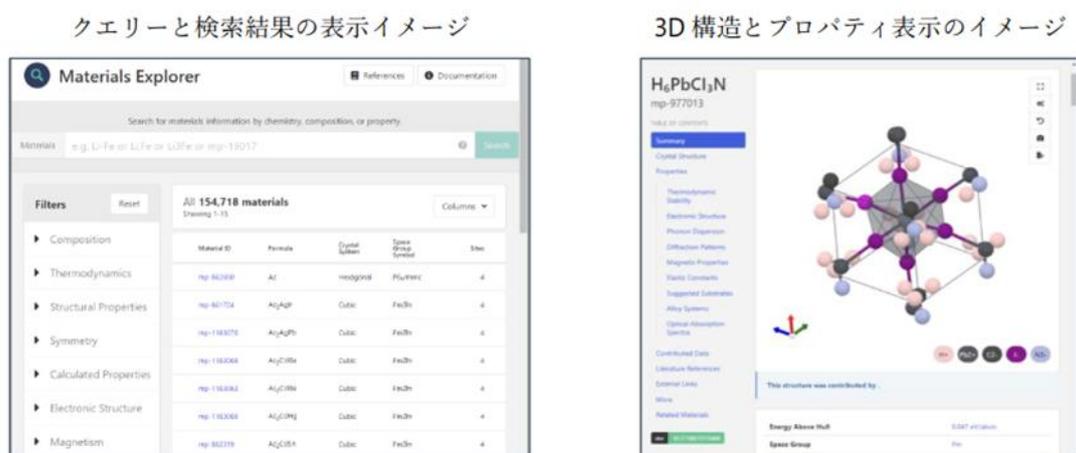


図7. 太陽電池材料データベースのWEBインターフェース

(C2) 太陽電池材料の粒界 (GB) が急速な非放射減衰を促進しデバイス性能を劣化させる、また逆に、電荷キャリアの寿命に対する GB の影響は、電荷再結合は主に非 GB 領域で起こり、GB は電荷の分離と収集を促進する、とも言われ、GB の影響は依然として不明瞭である。そこで非鉛 Sn・Ge ペロブスカイト太陽

電地材料の劣化過程の解明に向けて、分子動力学シミュレーションにより欠陥等の GB 構造を解析した。図 8 に FASnI₃(110) 粒界へのヨウ素格子間欠陥の 400K での拡散過程を示す。ヨウ素格子間欠陥は非常に移動しやすく、粒界に捕捉されるまで粒内を拡散する (~0.67 ns)。その後、境界に沿って上下に拡散する。ヨウ素格子間欠陥の構造から、MAPbI₃ ではダンベル形状、また FASnI₃ では、FA 分子のサイズが大きく、欠陥との相互作用が大きいいため、多くの代替形状が存在する。したがって MAPbI₃ よりも FASnI₃ の方が欠陥拡散性は高いと考えられる。このように GB に集積した欠陥が材料の劣化を促進し、またペロブスカイト材料の粒界での欠陥構造がデバイスの変換効率に大きく影響すると考えられる。これまでの種々のトライアルにより、ペロブスカイト材料のクラスターモデル化は容易ではないので、最終年度は「富岳」上で中嶋グループが共同開発している周期境界条件を用いた第一原理計算プログラム BigDFT により、粒界における欠陥の電子構造を解析し、さらに分子パッシベーションによる劣化抑制エンジニアリングを実施する。

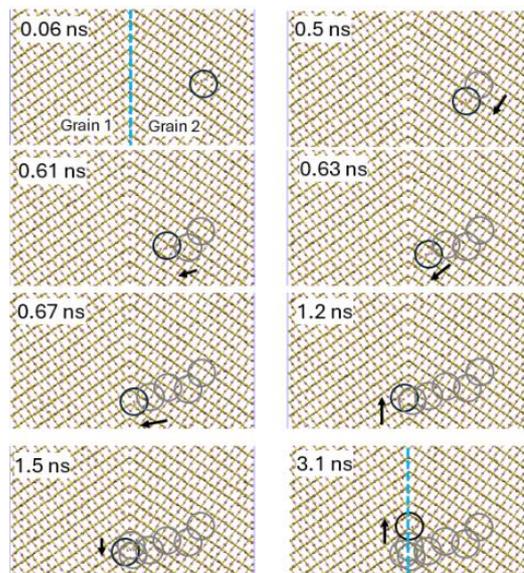
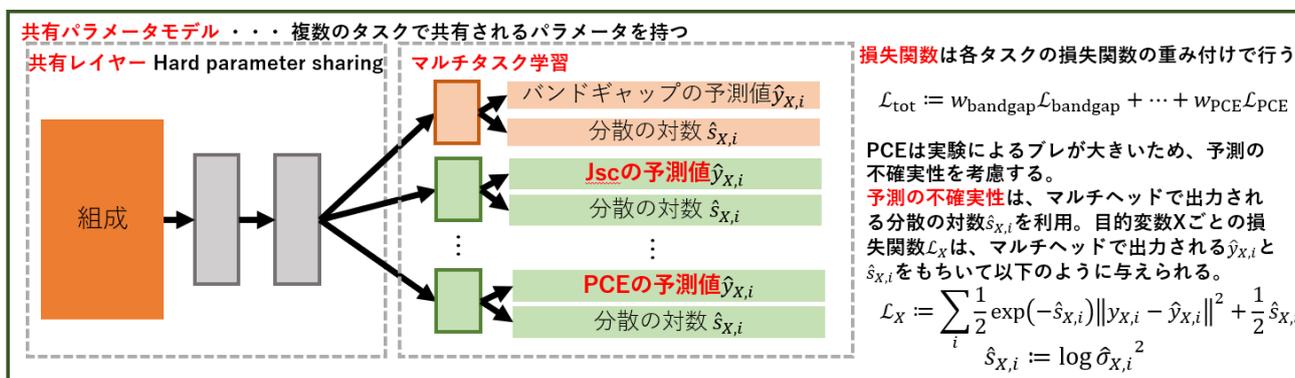


図 8. FASnI₃(110) 粒界へのヨウ素格子間欠陥の 400K での拡散過程

(C3) Sn・Ge系ペロブスカイト太陽電池材料のAI予測モデルを高度化するため、深層学習に基づくマルチタスク学習を導入し、各物性を同時に予測可能なモデルを構築した (スキーム1)。「京」および「富岳」でこれまでに得られた計算データと実験データを統合してモデルを訓練し、関連する複数のタスク (光変換効率 (PCE)、バンドギャップなど) 間の共通要因を効果的に学習することで、各タスクの予測の精度が向上する。また、予測結果に不確実性を考慮する手法を実装し、各タスクの標準偏差を出力可能とすることで、予測信頼度の評価や実験データのばらつきへの対応を強化した。電通大・早瀬Gと連携することで開発したAI予測モデルを用いたサイバー・フィジカルシステムを構築し、タンデム型太陽電池に適切なワイドギャップ非鉛Sn・Geペロブスカイト材料 (表2) の提案に成功した。



スキーム 1. マルチタスク学習を導入した深層学習モデル

表 2. AI 予測モデルによるワイドギャップ非鉛 Sn・Ge ペロブスカイト太陽電池材料のデバイス特性（カッコ内の数値は標準偏差の最大値）

組成	PCE [%]	FF	Voc [mV]	Jsc [mA/cm ²]	バンドギャップ [eV]
F Sn _{0.75} Ge _{0.25} I _{2.75} Br _{0.25}	6.82(8.29)	0.72(0.78)	551(655)	9.6(11.7)	1.80(±0.13)
F Sn _{0.75} Ge _{0.25} I _{2.50} Br _{0.50}	6.60(7.94)	0.72(0.78)	551(654)	9.2(11.4)	1.85(±0.14)
F A _{0.90} Cs _{0.10} S n _{0.75} Ge _{0.25} I _{2.50} Br _{0.50}	6.15(7.52)	0.71(0.77)	530(635)	9.6(12.0)	1.80(±0.15)

2-3. 活動（研究会の活動等）

成果報告会やシンポジウム開催

International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2025)を2025年1月21-22日に開催した。

本プロジェクトの公開報告会を2025年3月10日に理化学研究所（東京）にて開催した。

広報活動

「計算科学ロードマップ2023」（2024年5月31日発行）において本プロジェクト成果を含む今後のHPC技術の研究開発のあり方について中嶋 TL が執筆および分野の取りまとめを行った。

「計算工学ナビニュースレター」（東大生研革新センター発行）にて本プロジェクトに関する中嶋 TL のインタビュー記事が掲載された。

第4回「富岳百景」シンポジウムにてポスター展示した（2024年12月25日）。

HANAMI プロジェクト第1回シンポジウム（2025年1月13日、バルセロナ）にて山下教授がキーノート講演を行い、本プロジェクトについて広報した。

日本化学会第105春季年会（2025年3月26日）において村岡連携研究者がイノベーション共創プログラム「実用化に近づく次世代太陽電池とさらなる基盤技術開発」を企画し、中嶋 TL が本プロジェクト成果について講演した。

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) サブテーマ A		
サブテーマ(A1)	兵庫県神戸市灘区六甲台町 1-1 国立大学法人神戸大学	天能精一郎
サブテーマ(A2)	奈良県生駒市高山町 8916-5 国立 大学法人奈良先端科学技術大学 院大学	藤井幹也
サブテーマ(A3)	神奈川県横浜市中区千鳥町 8 番 地 ENEOS 株式会社 神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2 公立大学法人横浜市立大学	小鷹浩毅 山下晃一
(2) サブテーマ B		
サブテーマ(B1)	兵庫県神戸市灘区六甲台町 1-1 国立大学法人神戸大学	天能精一郎
サブテーマ(B2)	神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2 公立大学法人横浜市立大学	山下晃一
(3) サブテーマ C		
サブテーマ(C1)	兵庫県神戸市中央区港島南町 7- 1-26 理化学研究所	中嶋隆人

サブテーマ(C2)	神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2 公立大学法人横浜市立大学	山下晃一
サブテーマ(C3)	兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26 理化学研究所	中嶋隆人
	神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2 公立大学法人横浜市立大学	山下晃一
(4) プロジェクトの総合的推進	兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26 理化学研究所	中嶋隆人

別添1 学会等発表実績

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期
1	Exploratory data science on supercomputers for quantum mechanical calculations	W. Dawson, L. Beal, L. E. Ratcliff, M. Stella, T. Nakajima, L. Genovese	Electronic Structure, 6, 027003 (2024).	2024年6月11日
2	Definition of the Halogen Bond (IUPAC Recommendations 2013): A Revisit	Pradeep R. Varadwaj, Arpita Varadwaj, Helder M. Marques, and Koichi Yamashita	Cryst. Growth Des. 24, 5494-5525 (2024)	2024年6月24日
3	The analysis of defect structure of Sn-based perovskite solar cell materials using first-principles calculations	Mai Otake, Suzune Omori, Sana Kogure, Masanori Kaneko, Koichi Yamashita, Azusa Muraoka	J, Comput. Chem., Japan, 23, 40-43 (2024)	2024年7月12日
4	Long-range corrected density functional theory including a two-Gaussian Hartree-Fock operator for high accuracy core-excitation energy calculations of both the second- and third-row atoms (LC2gau-core-BOP)	D.-H. Ahn, T. Nakajima, K. Hirao, Jong-Won Song	J. Chem. Theory Comput. 20, 7113-7125 (2024).	2024年8月6日
5	Π -Hole Halogen Bonds Are Sister Interactions to σ -Hole Halogen Bonds	Pradeep R. Varadwaj, Arpita Varadwaj, Helder M. Marques, and Koichi Yamashita	Cryst. Growth Des. 24, 7789-7807 (2024)	2024年9月9日
6	Use of energy band-gap adjustment when simulating optical properties to maintain correct energy dissipation: Application to Ruddlesden-Popper oxysulfides	M. Kaneko, V. Nandal, K. Yamashita, K. Seki	AIP Advances, 14, 095115 (2024)	2024年9月
7	Data quality in the fitting of approximate models: A computational chemistry perspective	B. Chan, W. Dawson, T. Nakajima	J. Chem. Theory Comput. 20, 10468-10476 (2024).	2024年11月18日
8	Improvement on the screening of nonlinear commutator operations in	S. Basumallick, E. Xu, S. L. Ten-no	J. Chem. Phys., 161 184117 (2024)	2024年11月

	selective coupled-cluster using Lagrangian			
9	Reducing numerical precision requirements in quantum chemistry calculations	W. Dawson, K Ozaki, J Domke, T. Nakajima	J. Chem. Theory Comput. 20, 10826-10837 (2024).	2024年12月7日
10	The modeling perovskite materials CsPbX ₃ (X = I, Br) by changing the concentration of halide: experimental and DFT study	A. Miklas, Z. Starowicz, M. Lipinski, M. J. Wojcik, T. Nakajima, M. Z. Brela	Solid-State Chemistry and Physics, 5, 3 (2025).	2025年1月7日
11	Divalent cation doping into SrTiO ₃ for enhancing the photocatalytic performance of water splitting	K. Nishiguchi, T. Takayama, S. Takasuka, Y. Harashima, M. Fujii, S. L. Ten-no	J. Phys. Chem. Lett., 16 11, 2823-2830 (2025)	2025年3月
12	Data-driven Approach Considering Imbalance in Datasets and Experimental Conditions for Exploration of Photocatalysts	Wataru Takahara, Ryuto Baba, Yosuke Harashima, Tomoaki Takayama, Shogo Takasuka, Yuichi Yamaguchi, Akihiko Kudo, Mikiya Fujii	ACS Omega, 10, 14626 (2025)	2025年4月

2. 国際会議・シンポジウムにおける口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名（所属機関）	発表した場所（学会名等）	発表した時期
1	量子化学シミュレーションと材料インフォマティクスを活用した材料設計・探索（口頭）	中嶋隆人（理研）	2023年度光材料・応用技術研究会第4回，東京	2024年3月15日
2	デジタル技術によるクローズドループを用いた材料設計とプロセス開発（口頭）	藤井幹也（奈良先端大）	東京大学（物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の現在と未来」）	2024年4月3-4日
3	Geアロイ化Snペロブスカイトのキャリアダイナミクスの第一原理計算（ポスター）	金子正徳（横浜市大）、大竹真愛（日女大）、村岡梓（日女大）、山下晃一（横浜市大）	筑波大学（理論化学討論会）	2024年5月23日
4	First-Principles Calculations on Optical Properties and Defect Structures of Ge-Doped Sn Perovskites (poster)	Koichi Yamashita (YCU)	Stonehill College in Easton, US (Gordon Research Conference)	2024年6月19-20日
5	Our Recent Research Progress on Materials	Takahito Nakajima (RIKEN)	The 8th Japan-Czech-Slovakia	2024年6月20日

	Simulations and Informatics (口頭)		International Symposium on Theoretical Chemistry	
6	Computational science of photoenergy conversion materials (oral)	Koichi Yamashita (YCU)	YCU (25th Anniversary reunion & symposium of Morokuma group)	2024年7月25日
7	First-Principles Calculations on Optical Properties and Defect Structures of Ge-Doped Sn Perovskites (poster)	Masanori Kaneko (YCU), Mai Otake (JWU), Azusa Muraoka (JWU), Koichi Yamashita (YCU)	Hiroshima (ICARP2024)	2024年7月30日
8	機械学習によるペロブスカイト化合物の結晶相予測 (ポスター)	山本峻太、西口和孝、天能精一郎	第18回分子科学討論会	2024年9月
9	ペロブスカイト酸窒化物 ABO_2N (A=Ba, Sr, Ca) の光触媒活性の第一原理計算	西口和孝、藤本拓也、天能精一郎	第18回分子科学討論会	2024年9月
10	Designs of Novel Cu-Contained Oxide Photocatalysts by Machine Learning Models (ポスター)	Mayumi PUSPITA, Tomoaki TAKAYAMA, Yosuke HARASHIMA, Shogo TAKASUKA, Mikiya FUJII (奈良先端大)	名古屋大学 (第134回触媒討論会)	2024年9月17-20日
11	動的モンテカルロシミュレーションを組み込んだ光触媒焼成プロセスインフォマティクス (ポスター)	原嶋庸介、谷江孝輔、高須賀聖五、高山大鑑、藤井幹也 (奈良先端大)	福井謙一記念研究センター (量子化学探索研究所シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2024」)	2024年9月17日
12	酸硫化物光触媒 $Ln_2Ti_2O_5S_2$ (Ln=Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er) のキャリアダイナミクスの第一原理計算 (口頭)	金子正徳 (横浜市大)、山下晃一 (横浜市大)	京都大学 (分子科学会)	2024年9月18日
13	First-Principles Study on Carrier Dynamics in Ge-Doped Sn Perovskites (poster)	Koichi Yamashita (YCU), Masanori Kaneko (YCU)	Numazu (PVSEC35)	2024年11月12日
14	High-Throughput Computational Search for Stable Compositions and Configurations in High-Entropy Perovskite $SrTiO_3$: A Computational Study (poster)	Hiroki Kotaka ¹ , Yosuke Harashima ² , Hiroki Iriguchi ¹ , Tomoaki Takayama ² , Shogo Takasuka ² , Mikiya Fujii ² (1: ENEOS、2: 奈良先端大)	Boston (MRS Fall Meeting 2024)	2024年12月1-6日
15	AI-Driven optimization of flow polymerization processes and	Mikiya Fujii (奈良先端大)	Singapore (12th Singapore International	2024年12月9-13日

	photocatalysts materials, conjecture with the first principles calculations. (Oral)		Chemistry Conference)	
16	Prediction and demonstration of the solid solution ratio dependence of stannite-type $\text{Ag}_{2-x}\text{Cu}_x\text{ZnSn}_{1-y}\text{Ge}_y\text{S}_4$ photocatalysts active for hydrogen evolution under visible light using machine learning (oral)	Wataru Takahara ¹ , Mai Ogano ² , Fuga. Kagami ² , Yosuke. Harashima ¹ , Tomoaki Takayama ¹ , Shogo Takasuka ¹ , Yuichi. Yamaguchi ² , Akihiko Kudo ² , and Mikiya Fuji ¹ (1: 奈良先端大、2: 東京理科大)	横浜市開港記念会館 (日本 MRS 年次大会 2024)	2024 年 12 月 16-18 日
17	特異な相互作用や機能に関わる複雑な電子状態と理論化学的アプローチ (特別講演)	天能精一郎	第 52 回構造活性関連シンポジウム	2024 年 12 月
18	Computational Science for Photoenergy Conversion Materials (oral)	Koichi Yamashita (YCU)	Barcelona, Spain (HANAMI high-level symposium)	2025 年 1 月 13 日
19	First-Principles Calculations on Optical Properties and Defect Structures of Ge-Doped Sn Perovskites (oral)	Koichi Yamashita (YCU)	Barcelona, Spain (HANAMI high-level workshop)	2025 年 1 月 14 日
20	First-Principles Study on Carrier Dynamics in Ge-Doped Sn Perovskites (poster)	Koichi Yamashita (YCU), Masanori Kaneko (YCU)	Kyoto (IPEROP25)	2025 年 1 月 20 日
21	First-Principles Study on Carrier Dynamics in Ge-Doped Sn Perovskites (poster)	Koichi Yamashita (YCU), Masanori Kaneko (YCU)	Anaheim, USA (APS)	2025 年 3 月 19 日
22	動的モンテカルロシミュレーションを組み込んだサイバーフィジカルループによる不純物ドーパ SrTiO ₃ 光触媒性能の最適化 (ポスター)	水上昌勇 ¹ 、原嶋庸介 ¹ 、高山大鑑 ¹ 、高須賀聖五 ¹ 、天能 精一郎 ² 、西口和孝 ² 、藤井幹也 ¹ (1: 奈良先端大、2: 神戸大)	関西大学 千里山キャンパス (日本化学会第 105 春季年会)	2025 年 3 月 26-29 日
23	解釈性を考慮したデータ同化手法の構築とペロブスカイト型光触媒化合物のバンドギャップ予測 (ポスター)	新川主安 ¹ 、原嶋庸介 ¹ 、高須賀聖五 ¹ 、高山大鑑 ¹ 、小鷹 浩毅 ² 、入口広紀 ² 、藤井幹也 ¹ (1: 奈良先端大、2: ENEOS)	関西大学 千里山キャンパス (日本化学会第 105 春季年会)	2025 年 3 月 26-29 日

24	機械学習を用いた外挿的探索による新規可視光応答性金属硫化物光触媒の開発 (口頭)	各務風雅 1、高原渉 2、原嶋庸介 2、高山大鑑 2、山口友一 1、藤井幹也 2、工藤昭彦 1 (1: 東京理科大、2: 奈良先端大)	関西大学 千里山キャンパス (日本化学会第 105 春季年会)	2025 年 3 月 26-29 日
25	Experimental demonstration of dependence of solid solution ratio on sacrificial hydrogen evolution over chalcopyrite type $(\text{Cu}_z\text{Ag}_{1-z}\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y)_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}_2$ photocatalysts predicted by machine learning (口頭)	小鹿野真衣 1、高原渉 2、原嶋庸介 2、山口友一 1、藤井幹也 2、工藤昭彦 1 (1: 東京理科大、2: 奈良先端大)	関西大学 千里山キャンパス (日本化学会第 105 春季年会)	2025 年 3 月 26-29 日
26	シミュレーションとインフォマティクスによる太陽電池材料設計・探索 (口頭)	中嶋隆人 (理研)	日本化学会第 105 春季年会	2025 年 3 月 26 日