

センター利用による研究成果

—2023 年度計算機利用結果報告書から—

【4103 数学一般(含確率論・統計数学)】

1. Natsuki Tsutsumi, Kengo Nakai, and Yoshitaka Saiki : Constructing low-dimensional ordinary differential equations from chaotic time series of high- or infinite-dimensional systems using radial-function-based regression : *Physical Review E*, Vol.108, pp.054220 -, 2023

【4303 物性 II】

2. Hirofumi Sakakibara, Naoya Kitamine, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki : Possible High Tc Superconductivity in La₃Ni₂O₇ under High Pressure through Manifestation of a Nearly Half-Filled Bilayer Hubbard Model : *Physical Review Letters*, Vol.132, No.10, pp.106002 -, 2024
3. Tatsuya Kaneko, Hirofumi Sakakibara, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki : Pair correlations in the two-orbital Hubbard ladder: Implications for superconductivity in the bilayer nickelate La₃Ni₂O₇ : *Physical Review B*, Vol.109, No.4, pp.045154 -, 2024
4. Hirofumi Sakakibara, Masayuki Ochi, Hibiki Nagata, Yuta Ueki, Hiroya Sakurai, Ryo Matsumoto, Kensei Terashima, Keisuke Hirose, Hiroto Ohta, Masaki Kato, Yoshihiko Takano, Kazuhiko Kuroki : Theoretical analysis on the possibility of superconductivity in the trilayer Ruddlesden-Popper nickelate La₄Ni₃O₁₀ under pressure and its experimental examination: Comparison with La₃Ni₂O₇ : *Physical Review B*, Vol.109, pp.144511 -, 2024

【4305 原子・分子・量子エレクトロニクス・プラズマ】

5. Ayaki Sunaga, Yuiki Takahashi, Amar Vutha,

Yoshiro Takahashi : Measuring the nuclear magnetic quadrupole moment of optically trapped ytterbium atoms in the metastable state : *New Journal of Physics*, Vol.26, No.2, pp.023023 -, 2024

6. 石山泰樹, 川瀬北斗, 小野滉貴, 高野哲至, 砂賀彩光, 高橋義朗 : 中性イッテルビウム原子の内殻励起時計遷移の精密分光 : 第 79 回日本物理学会春季大会, 2024

【4601 物理化学】

7. Jiung Jang, Jeong Woo Jo, Tatsuhiko Ohto, and Hyo Jae Yoon : Seebeck Effect in Molecular Wires Facilitating Long-Range Transport : *J. Am. Chem. Soc.*, 2024
8. Murata, K.; Oda, A.; Satsuma, A.; Sawabe, K. : Unveiling Static and Dynamic Structures of Pd Clusters Influenced by Al₂O₃ Surfaces: DFT and AIMD Studies: *J. Phys. Chem. C*, Vol.127, No.41, pp.20267 - 20275, 2023
9. 沢邊恭一・築山卓生・織田晃・薩摩篤 : TiO₂ に埋め込まれた単原子触媒への CO 吸着に関する汎化機械学習モデルのための特徴量探求: 第 17 回分子科学討論会予稿, 2023
10. Ryuta Uenishi, Alexie Boyer, Shutaro Karashima, Alexander Humeniuk, and Toshinori Suzuki : Signatures of Conical Intersections in Extreme Ultraviolet Photoelectron Spectra of Furan Measured with 15 fs Time Resolution : *J. Phys. Chem. Lett.*, Vol.15, No.8, pp.2222 - 2227, 2024
11. Haruka Yotsuya, Miho Tanaka, Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka : Histidine Protonation States Regulate the State Transition from R State Hemoglobin : *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol.128, No.12, pp.2853 - 2863, 2024

【4602 有機化学】

12. 谷本裕樹, 足立遼, 京角祥吾, 友廣岳則: N2, N3 の官能基を用いた元素ブロック合成化学: 第72回高分子討論会, pp.3B08, 2023
13. 大槻葵, 京角祥吾, 谷本裕樹, 友廣岳則: スルフィン酸捕捉に応答する蛍光標識分子の開発: 日本薬学会第144年会, pp.29P-am047S, 2024
14. Hiroki Tanimoto, Shogo Kyogaku, Aoi Otsuki, Takenori Tomohiro: Synthesis of Naphthalimide Azocarboxylates Showing Turn-on Fluorescence by Substitution Reaction With Sulfinates: Chemistry-An Asian Journal, Vol.19, No.9, pp.e202400145, 2024

【5001 機械材料・材料力学】

15. 西川雅章, 篠原綾汰: CFRP 燃焼現象に対する熱・流体・構造連成解析の検討: 2023 年度 JCOM 若手シンポジウム 講演論文集, 2023
16. 松田和徳, B. Kötter, 西川雅章: 赤外線サーモグラフィによる CFRP 複合材料の AFP 積層時の欠陥発生の評価: 第48回複合材料シンポジウム 講演論文集, 2023
17. M. Nishikawa, R. Shinohara: Development of thermal fluid/structure coupled analysis on CFRP flammability: The 2nd Japan-China-Korea Joint Symposium on Composite Materials (口頭発表), 2023
18. 池田智行, 黒岩健, 西川雅章: 熱・流体・構造連成解析を用いたオートクレーブ内の温度分布に関する研究: 第61回飛行機シンポジウム 講演論文集, 2023

【5204 水工水理学】

19. 仲吉 信人, 中山 拓巳: 気象シミュレーションを用いた首都圏における暑熱ストレスの将来変化: 環境情報科学論文集, Vol.37, No., pp.160 - 165, 2023

【5402 無機材料・物性】

20. F. Oba: Computational design and exploration of nitride and oxide semiconductors: J. Ceram. Soc. Jpn., Vol.131, No.8, pp.392 - 397, 2023
21. 長藤瑛哉, 我毛智哉, 裴星旻, 高橋亮, 大場史康: 第一原理計算を用いた La2SnO2S3 におけるキャリア生成・補償機構の解明: 第43回電子材料研究討論会, 2023

22. 石井孝憲, 高橋 亮, 長藤瑛哉, 大場史康: 第一原理計算による α -(AlxGa1-x)2O3 固溶体の酸素空孔の系統的解析: 第43回電子材料研究討論会, 2023
23. T. Nagafuji, T. Gake, A. Takahashi, S. Bae, and F. Oba: Defect formation and carrier compensation in La2SnO2S3: A first-principles study: MRM2023/TUMRS-ICA2023, 2023
24. T. Ishii, A. Takahashi, T. Nagafuji, and F. Oba: Systematic analysis of oxygen vacancies in α -(AlxGa1-x)2O3 alloys using first-principles calculations: MRM2023/TUMRS-ICA2023, 2023
25. F. Oba: Computational design and exploration of nitride and oxide semiconductors: 13th International Conference on Advanced Materials and Devices (ICAMD2023), 2023
26. T. Ishii, A. Takahashi, T. Nagafuji, and F. Oba: Systematic computational analysis of oxygen vacancies in α -(AlxGa1-x)2O3 alloys: STAC-D2MatE2024, 2024
27. T. Nagafuji, T. Gake, S. Bae, A. Takahashi, and F. Oba: Clarification of point defect formation in La2SnO2S3 by first-principles calculations: STAC-D2MatE2024, 2024
28. 長藤瑛哉, 我毛智哉, 裴星旻, 高橋亮, 大場史康: 層状オキシサルファイド La2SnO2S3 における点欠陥・キャリア生成に関する第一原理計算: 第62回セラミックス基礎科学討論会, 2024
29. 中川亮祐, 高橋亮, 佐藤暢哉, WANG Tianwei, 大場 史康: Bi 系酸化物の局所構造・電子状態の系統的理論解析: 第62回セラミックス基礎科学討論会, 2024
30. 長藤瑛哉, 我毛智哉, 裴星旻, 高橋亮, 大場史康: La2SnO2S3 における点欠陥及び自己束縛電子に関する第一原理計算: 日本金属学会 2024 年春期(第174回) 講演大会, 2024
31. 中川亮祐, 高橋亮, 佐藤暢哉, WANG Tianwei, 大場 史康: Bi 系酸化物における局所構造・物性の統計解析: 日本金属学会 2024 年春期(第174回) 講演大会, 2024
32. S. Kiyohara, Y. Hinuma, and F. Oba: Band alignment of oxides by learnable structural-

descriptor-aided neural network and transfer learning : J. Am. Chem. Soc., Vol.146, No.14, pp.9697 - 9708, 2024

【6801 化学系薬学】

33. Tsukasa Tawatari, Ritsuki Kato, Riku Kudo, Kiyosei Takasu,* and Hiroshi Takikawa* : Intramolecular Ynamide - Benzyne (3+2) Cycloadditions : Angewandte Chemie International Edition, No.e202300907, 2023