

令和3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5年5月30日

国立研究開発法人理化学研究所

中嶋 隆人

## 目次

1. 補助事業の目的.....	- 1 -
2. 令和4年度（報告年度）の実施内容 .....	- 1 -
2-1. 当該年度（令和4年度）の事業実施計画 .....	- 1 -
2-2. 実施内容（成果） .....	- 1 -
2-3. 活動（研究会の活動等） .....	- 10 -
2-4. 実施体制 .....	- 10 -

## 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

### 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・ウイ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3年度（報告年度）の実施内容

#### 2-1. 当該年度（令和3年度）の事業実施計画

- (1) ハイスループット・シミュレーションによる新規太陽電池材料の設計
  - ・富岳におけるハイスループット・シミュレーション技術の開発
  - ・二重ペロブスカイト構造材料に対するハイスループット・シミュレーション
- (2) 高効率・高耐久な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計
  - ・機械学習の教師データ用の実験論文データ収集
- (3) 水素製造のための可視光応答光触媒の開発
  - ・水素製造のための可視光応答光触媒の候補材料 SrTiO<sub>3</sub>:Al, Ta<sub>3</sub>N<sub>5</sub>, Y<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>S<sub>2</sub> を中心としたドーピングシミュレーションと反応機構解明
- (4) 感染症対策としての高機能光触媒の開発
  - ・実験グループとの連携によるホスト半導体の検討と選定
  - ・感染症ウイ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還元分解反応機構の解明
  - ・金属酸化物上での過酸化水素の反応機構の解明
- (5) 太陽光エネルギー変換デバイスの高効率化と実用化に向けた材料設計
  - ・水分解光触媒，非鉛ペロブスカイト太陽電池材料における光誘起キャリアの拡散定数の推算法の確立
- (6) AI とサイバー・フィジカルシステムの構築
  - ・ワイドバンドホスト半導体系に対するグラフ構造を用いた予測 AI の構築
- (7) プロジェクトの総合的推進
  - ・10月頃にキックオフミーティングを開催
  - ・3月に成果報告会を兼ねたシンポジウムを開催

#### 2-2. 実施内容（成果）

- (1) ハイスループット・シミュレーションによる新規太陽電池材料の設計
  - ・富岳におけるハイスループット・シミュレーション技術の開発（理研）

・二重ペロブスカイト構造材料に対するハイスループット・シミュレーション（理研）

「富岳」を使った第一原理計算によるペロブスカイト太陽電池候補材料のスクリーニングの実施可能性を検証した。まず、京コンピュータで使用したプログラム群を「富岳」に移植し、動作を検証した。その後、より汎用的な組成のペロブスカイト候補材料について計算を行えるように改良した。対象とするペロブスカイトの組成式は  $A_{1-x}A'_x B_{1-y}B'_y X_{1-z}X'_z$  (A サイトカチオン: Rb, Cs, メチルアンモニウムなどの有機小分子; B サイトカチオン: Be-Bi の 49 元素; X サイトアニオン: Cl, Br, I) とした。第一原理計算ではスーパーセル (4 formula unit) の構造について計算を行い、 $x = 0, 1/4, 1/2$ ;  $y = 0, 1/4, 1/2$ ;  $z = x+2y$  とした。ある組成に対して構造が一意に決まるとは限らないため、(i) ある組成比の構造全てを生成するプログラム、(ii) 構造を pymatgen により解析し、鏡映などの重複を除去するプログラム、(iii) (i) で生成したテンプレート構造から任意の原子団に変換するプログラムを実装した。候補構造のうち空間群が極大のものに絞り込んでスクリーニングを行う。スクリーニングの手続きとしては、ある空間群の構造を乱数で揺動して複数の初期構造を生成し、構造最適化を行って安定構造を決定する。得られた最安定構造について高精度の一点計算を行い、バンドギャップ、バンド端位置、正孔・電子有効質量などを評価する。構造最適化が本実施課題のボトルネックになるため、本年度は重点的にハイスループット・シミュレーションを行った。早期成果創出を実現するために、A サイトカチオンとしてアルカリ金属 (Rb, Cs) を用いた組成を中心に 40 万構造のハイスループット・シミュレーションを実施した。

平面波基底にもとづく密度汎関数法計算には VASP プログラムバージョン 6.2.1 を用いた。プロファイリングの結果、「富岳」においては高速 Fourier 変換 (FFTW ライブラリ) が計算上のボトルネックであることが判明した。また、線形代数ライブラリ BLAS/LAPACK について、富士通 SSL II では Cholesky 分解などでエラーが発生するため、OpenBLAS を用いることで問題を解決した。研究成果の社会実装を実現するために得られたデータをデータベースとして提供する予定であるが、利用者が多い点を鑑みて Materials Project 互換となるような API を採用したデータベースの構築を開始した。

以上によりハイスループット・シミュレーション技術の「富岳」での実施可能性が確認できたため、来年度は有機分子を用いたものも含めてスクリーニングを継続して行う。

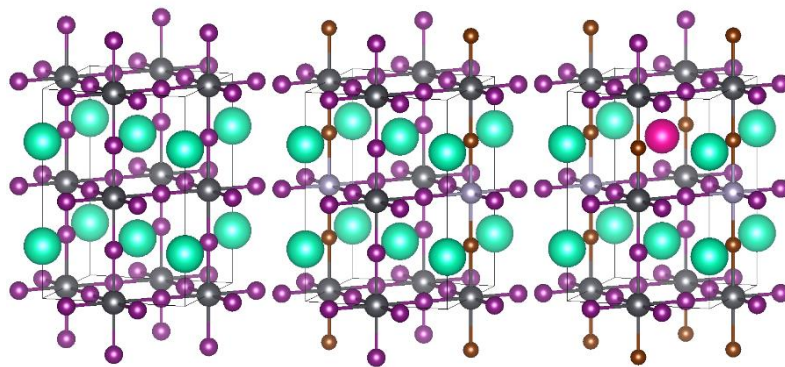


図 空間群が極大な構造の例: 左から  $A_4B_4X_{12}$  (#221  $Pm-3m$ )、 $A_4B_3B'X_{10}X'_2$  (#123  $P4/mmm$ )、 $A_3A'B_3B'X_9X'_3$  (#25  $Pmm2$ )

(2) 高効率・高耐久な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計

・機械学習の教師データ用の実験論文データ収集（理研）

「富岳」において VASP によるバンド計算に必要な計算時間を見積もるため、典型的なペロブスカイ

ト MAPbI<sub>3</sub> をターゲットとし、2x2x2 のスーパーセルに対してガンマ中心 2x2x2 をサンプル k 点とした PBE-D3 汎関数による構造最適化を行い、PBE 汎関数による電荷密度の最適化(サンプル k 点：ガンマ中心 6x6x6)の後、スピン・軌道(SO)-PBE 計算(サンプル k 点：ガンマ中心 4x4x4)とその波動関数を初期値とした SO-HSE 計算(サンプル k 点：ガンマ中心 2x2x2)を実行した。計算時間はおおよそ 40 ノード時間であった。この結果から、1 回のサイバーループで 1,000 通りのペロブスカイト候補を選び、それらに対して同条件の計算を行った場合に、おおよそ「富岳」400 万ノード時間で 100 回のサイバーループを繰り返すことが可能であると見積もることができた。最終的に約 10 万通りのペロブスカイト候補のサンプリングによって、ペロブスカイト候補を探索するガウス回帰モデルを改良し、改良されたモデルを用いて最適なペロブスカイト候補の探索を実施する。

A サイトの候補分子として PubChem から 391,344 分子を集めて、それらのうち原子数が 20 以下の 41,144 分子を候補分子として、分子記述子を計算した。また、任意の A サイト候補に対して系統的にペロブスカイトのバンド計算を実施するために、PBE による A サイトの構造最適化を行い、それを含めたペロブスカイトの構造を初期構造として、上記のバンド構造計算のための入力ファイルを用意する方法を実装した。

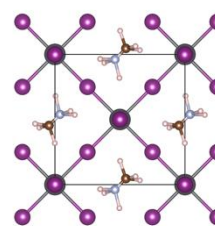


図 生成された MAPbI<sub>3</sub> の初期構造

また、「富岳」で深層学習モデルを構築するためのモジュールとして、PyTorch と TensorFlow を比較調査した結果、可読性と実装の容易性から PyTorch が最適であることがわかった。同モジュールを用いてガウス過程回帰モデルの実装も GPyTorch モジュールによって実現可能であり、

Horovod を用いてデータ並列にも対応できることを令和 4 年度の本格実施に向けて確認した。

令和 4 年度に実施した内容（令和 3 年度からの繰り越し）

既知データを元にエネルギー変換効率予測モデルを構築し、逆設計で得られた候補に対する仮想実験を繰り返すことで予測モデルを改良することで、改良された予測モデルから高いエネルギー変換効率が期待されるペロブスカイト太陽電池を提案する機械学習プログラムの第 1 版を開発した。繰越予算で購入した GPU 計算機で動作することを確認した。

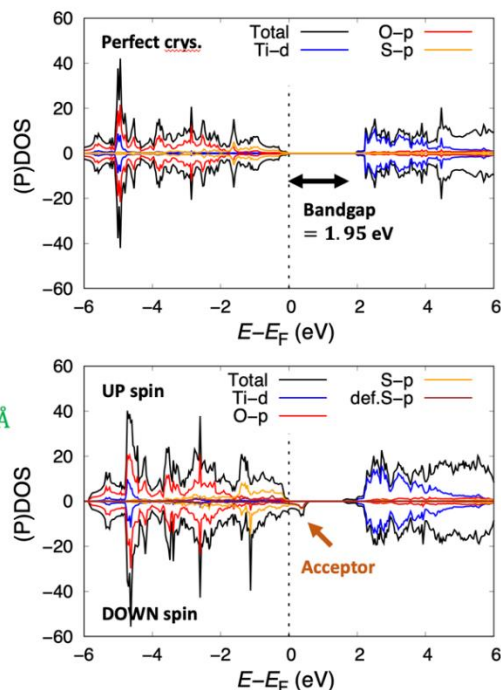
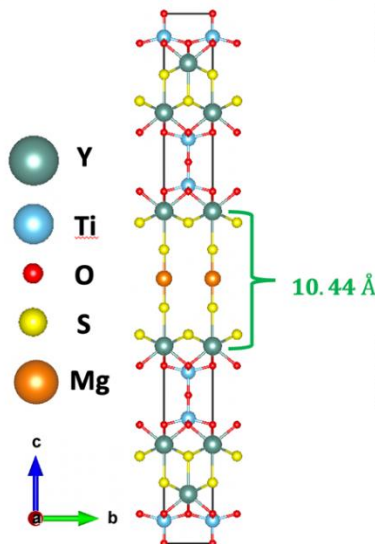
### (3) 水素製造のための可視光応答光触媒の開発

- ・水素製造のための可視光応答光触媒の候補材料 SrTiO<sub>3</sub>:Al, Ta<sub>3</sub>N<sub>5</sub>, Y<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>S<sub>2</sub> を中心としたドーピングシミュレーションと反応機構解明（神戸大）

令和3年度は  $Y_2Ti_2O_5S_2$  の面欠陥の研究を中心に行なった。東大・信州大のグループがフラックス法に

より結晶化した  $Y_2Ti_2O_5S_2$  にマグネシウム原子が関係した面欠陥が存在することを透過電子顕微鏡の解析で示しており、第一原理計算によりこの構造の特定と電子的な性質を調べた。元素分析から示唆される組成をもとに計算を試したところ、図に示すようなイットリウム原子に配位するイオウ原子をマグネシウムが架橋する面欠陥構造が安定であることが分かり、構造最適化の結果は実験のイオウ層間隔ほぼ完全に再現した（実

■ S-Mg-S planar defect model:  
 > Composite formula:  $Y_6Ti_6O_{15}S_8Mg$   
 >  $a = b = 3.852 \text{ \AA}; c = 41.148 \text{ \AA}$   
 >  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

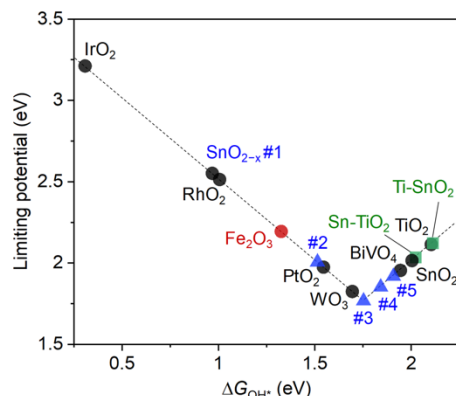
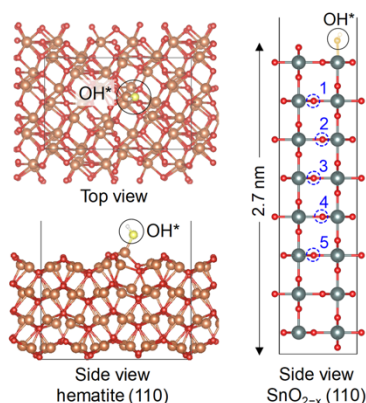


験値  $10.38 \text{ \AA}$  に対し理論値  $10.44 \text{ \AA}$ ）。 $Y_2Ti_2O_5S_2$  は可視光応答材料であり、 $1.95 \text{ eV}$  程度のバンドギャップを持つが、面欠陥では欠陥内のイオウの x-y 平面 p 軌道にスピンの分極した 2 つの正孔が形成される p 型の欠陥であることが明らかになった。吸収スペクトルの解析から、この欠陥準位は電荷再結合を促進する反面、酸素欠陥やイオウ欠陥の影響で本来 n 型半導体である  $Y_2Ti_2O_5S_2$  の触媒活性に不利益と考えられるドナー電子を抑制する可能性もあり、この観点からの研究が進んでいる。

#### (4) 感染症対策としての高機能光触媒の開発

・実験グループとの連携によるホスト半導体の検討と選定（神戸大）

今年度は、ヘマタイトをホストとしてスズとチタンをドーピングした複合酸化物の研究を行なった。スズとチタンをドーピングしたヘマタイト複合酸化物過酸化水素発生は高い選択性で過酸化水素発生を行うことが実験的に示されており、焼結により偏



析したスズやチタンの酸化物が助触媒として働くものと考えられる。本研究では、第一原理計算を用いて  $Fe_2O_3$ 、 $Ti-SnO_2$ 、 $Sn-TiO_2$ 、 $SnTiO_3$ 、 $SnO_{2-x}$ 、 $Sn_{0.5}Ti_{0.5}O_{2-x}$  表面における OH ラジカルの吸着エネルギーから二電子水分子酸化による過酸化発生のリミティングポテンシャルの計算を行なった。図に示す様に、過酸化

水素発生のリミティングポテンシャルはサバティエ則に従って、吸着エネルギーが 1.75eV 付近で極小を持つボルケーノ型の振る舞いを示すが、宿主材料のヘマタイトはその先端から外れる吸着エネルギーを示している。これに対し、比較的表から深い位置に酸素欠陥を伴う酸化スズが高選択率の過酸化水素発生を示すことが示唆され、ヘマタイト表面に偏析した 4 価のスズ助触媒として作用している可能性が計算により示唆された。本研究内容は 3 月 23 日付で Nature Communications 誌に掲載され、複数のプレスリリース・新聞記事で紹介されている。

・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還元分解反応機構の解明（京都大）

光触媒によるウィルス不活性化のメカニズムについては、1) 水の酸化により生成する OH ラジカルによるウィルス酸化と、2) 照射により生成する正孔注入によるウィルス酸化が考えられるが、ウィルス不活性化が光触媒の露出表面、つまりウィルスと光触媒表面との相互作用に依存することから、正孔の直接注入によるウィルス不活性化であると予測される。そこで酸化チタン光触媒によるウィルス不活性化の高効率化に向けて、1) ウィルス吸着特性の向上、2) 正孔を有効に生成するための電荷分離効率の向上、の観点から、第一原理計算と量子化学計算により、最適光触媒露出面の探索を目的とした。ルチル相 (001)、(100)、(101)、(110) 面の酸化力を第一原理計算による局所状態密度解析により、またタンパク質分子（グリシン）の (001) 表面への吸着性を量子化学計算に基づいて解析した。図 1 に局所密度解析の結果を示す。表面での価電子帯上端は、それぞれ (001):1.8eV、(100):1.7eV、(101):1.5eV、(110):1.6eV と計算され、(001) 面の酸化力が最も高いと予測される。また第一原理計算により最適化された表面構造を切り出し、タンパク質分子の吸着エネルギーをクラスターモデルで量子化学計算により算出した。表面への分子配向により、種々の吸着構造が存在し、吸着エネルギーは 1eV 程度の分散を持つことが分かった。今後、アナターゼ相、ブルッカイト相での各面について計算を行い、最適光触媒露出面を提案する。

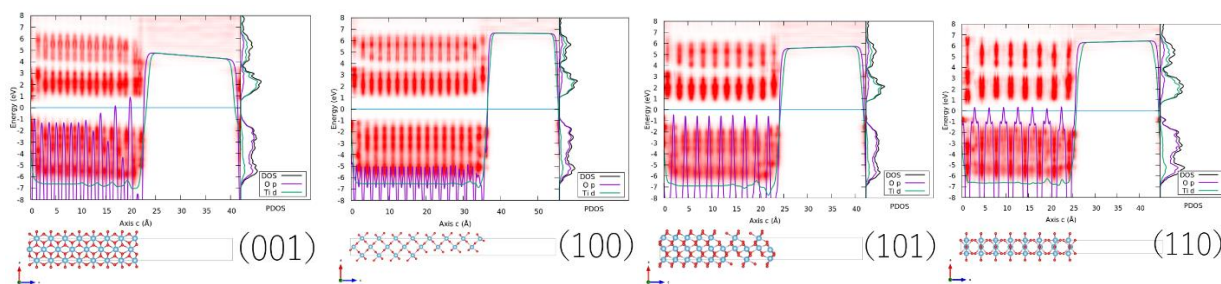


図 1 ルチル相 (001)、(100)、(101)、(110) 面の局所状態密度 (DFT/PBESOL)

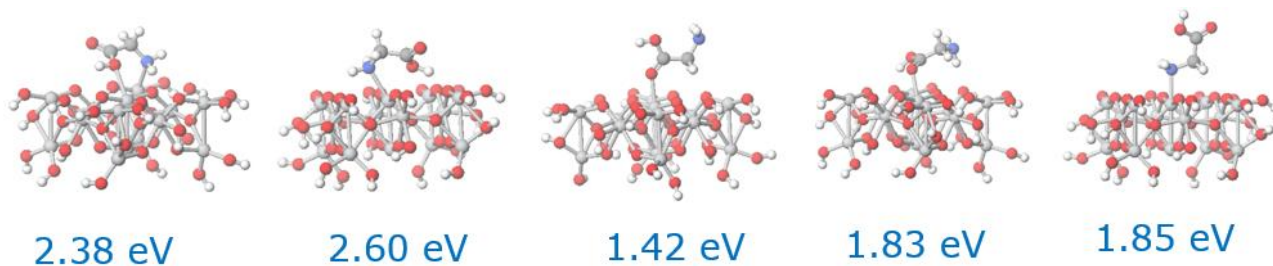


図 2 Glycine のルチル相 (001) 面への吸着エネルギー (B3LYP+D3/LANL2DZ、6-31G\*\*)

(5) 太陽光エネルギー変換デバイスの高効率化と実用化に向けた材料設計

・水分解光触媒、非鉛ペロブスカイト太陽電池材料における光誘起キャリアの拡散定数の推算法の確立 (京都大・ENEOS)

太陽光エネルギー変換材料のデバイス性能は、光誘起キャリアの拡散定数で評価できる。水分解光触媒、非鉛ペロブスカイト太陽電池材料における光誘起キャリアの拡散定数の推算を、第一原理計算により得られるキャリア・フォノン相互作用と誘電関数を用いたフレーリッヒモデルにより算出し、新規設計された材料の評価を行う。光触媒材料  $\text{WO}_3$ 、 $\text{SrTiO}_3$  の光誘起キャリアの拡散定数を、第一原理計算によるキャリア・フォノン相互作用を用いたフレーリッヒモデルにより算出し、水分解光触媒反応の内部変換効率の観点から材料評価を行った。電子状態計算、フォノン分散、電子-フォノン結合の計算には立方晶の構造を用いた。ブリリアンゾーンの積分は、構造最適化、フォノン計算には  $8 \times 8 \times 8$ 、PDOS、バンド構造には  $16 \times 16 \times 16$  k-point grid 上で行った。GGA/PBE レベルでの密度汎関数理論に基づく第一原理計算のために QUANTUM ESPRESSO を用いた。

電子-フォノン相互作用を第一ブリリアン領域で平均した電子-フォノン・スペクトル密度 ( $\alpha^2 A$ ) の表式におけるフェルミ・エネルギーを任意のエネルギー  $\varepsilon_A$  とし、任意のエネルギー領域への適用を可能にした。

$$\alpha^2 A(\omega; \varepsilon_A) = \frac{1}{N(\varepsilon_A)} \int \frac{dkdq}{\Omega_{\text{BZ}}^2} \sum_{i,j,\nu} |g_{ij,\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_A) \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_A) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu})$$

ここで、 $g_{ij,\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$  は電子-フォノン結合行列要素で、 $\nu$  はフォノンのブランチインデックス、 $\mathbf{k}$  は  $\mathbf{k}$  点、 $\mathbf{q}$  はフォノンの波動ベクトル、 $i, j$  はバンドインデックス、 $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ 、 $\varepsilon_{n\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  はブロッホ状態のエネルギー、 $\omega_{\mathbf{q}\nu}$  はフォノンの周波数である。

光触媒材料  $\text{SrTiO}_3$  の価電子帯 (VB) 上端、伝導帯 (CB) 下端近傍における  $\alpha^2 A$  の計算結果を下図に示す。それぞれ縦型光学 (LO) フォノン、LO1、LO2、LO3 との相互作用が顕著にみられ、電子、正孔は LO フォノンとの相互作用により、フレーリッヒ・ポーラロンを形成すると考えられる。

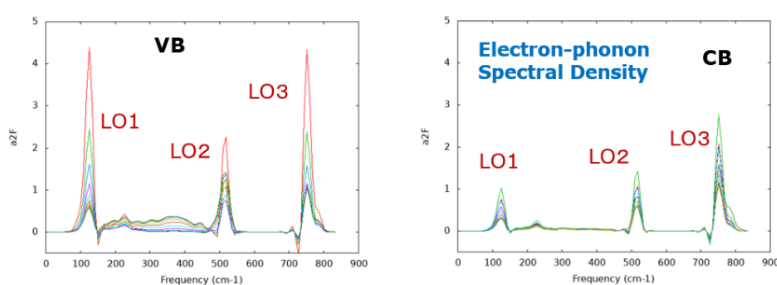


図  $\text{SrTiO}_3$  の電子-フォノン・スペクトル密度

ポーラロンの自己エネルギーはフレーリッヒ結合定数 ( $\alpha_F$ ) を用いて、 $E_0 = -\alpha_F \hbar\omega$  で与えられる。

$$\alpha_F = \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \sqrt{\left( \frac{m}{2\hbar\omega} \right)}$$

ここで  $\varepsilon_\infty$  は光学誘電率、 $\varepsilon_0$  は静止誘電率、 $m$  はバンド有効質量、 $\hbar\omega$  は LO フォノンの振動数をあらわす。光触媒材料  $\text{WO}_3$  のフレーリッヒ・ポーラロンについての  $\alpha_F$ 、Feynman の経路積分変分法により計算した



300Kでの寿命、移動度を表にまとめる。

表 WO<sub>3</sub>のフレリッヒ結合定数( $\alpha_F$ )、ポーラロンの寿命、移動度

	Electron-polaron		Hole-polaron	
	LO1	LO2	LO1	LO2
$\alpha_F$	0.68	1.02	1.74	2.62
$m_p$	0.26	0.28	2.28	2.99
$r_p$ (10 <sup>-8</sup> m)	3.14	1.42	1.99	0.87
$\tau_K$ (ps)	1.84	0.25	0.71	0.09
$\mu_H$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	643	146	30	6

興味あることに光触媒材料 WO<sub>3</sub>の電子ポーラロンは正孔ポーラロンと比較して、寿命が約2倍、移動度は約20倍大きく得られている。この傾向はポーラロン有効質量の違いに起因すると考えられる。また電子ポーラロンと正孔ポーラロンの相互作用は、電子と正孔のクーロン相互作用が強誘電性ペロブスカイトの大きな誘電率により遮蔽されているため、ポーラロン形成にともなう格子歪みが大きい場合、反発的になると予想される。したがって電子ポーラロンと正孔ポーラロンの反発的な相互作用が、bimolecularな再結合を抑制し、キャリアの長距離拡散を可能にしていると考えられる。

#### (6) AI とサイバー・フィジカルシステムの構築 (奈良先端大)

本年度は、光触媒による水素生成速度の機械学習モデルの構築・検証を行った。対象には共同研究者である信州大学・ARPCHEMの堂免・久富グループが所有するTa系光触媒材料による光触媒活性を選んだ [1]。

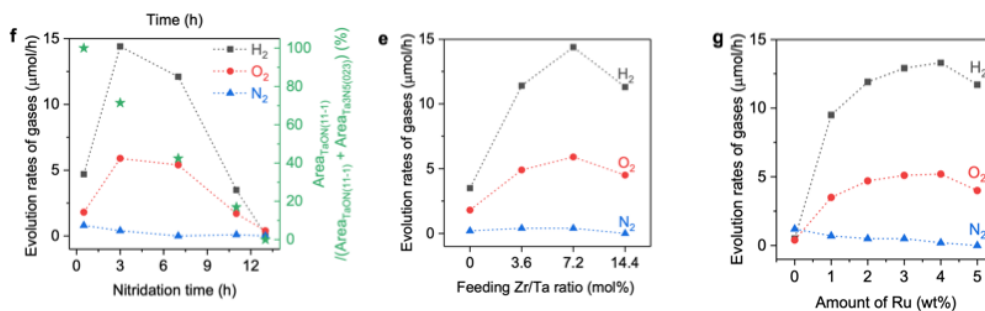


図1 Ta系光触媒が窒化時間、Zr/Ta原料添加比、助触媒量に依存する。[1]より引用

この Ta 系光触媒は、光触媒材料の合成プロセスに光触媒活性が強く依存する (図 1)。例えば、材料のアモルファル  $Ta_2O_5 \cdot 3 \cdot 3H_2O$  を  $NH_3$  ガスで窒化することで  $TaON$ 、 $Ta_3N_5$  の生成比率が変化する。その生成比率は、XRD スペクトルの面積比率として表現されているが、正確な生成物の組成式は同定されていない。また、窒化時間の他に、Ta を Zr で置換することを目的に Zr 元素が初期原料として添加されているが、どの程度の Zr が生成物に含有されているかは同定されていない。そこで、本研究では生成物の正確な元素比率を同定するのではなく、合成プロセスによって、機械学習モデルを構築することとして、特徴量として、“窒化時間”、“XRD 面積比”、“Zr/Ta 原料添加比”を設定した。ここで、触媒の組成式を定義するために、XRD 面積比に応じた  $(TaON)_x(Ta_3N_5)_{(1-x)}$  を定義し、触媒組成比として特徴量化した。加えて、光触媒材料は助触媒に用いた物質種および量に依存し、助触媒には、Ru、Pt、Rh、 $Cr_2O_3$ 、 $IrO_2$  が用いられる。実際にはこれらの助触媒は Ta 系触媒の表面に特定の構造を保持しつつ担持されていると考えられているが、本研究ではこれらの助触媒に関する情報を機械学習の特徴量に取り込むため、助触媒の組成式は配合比率からトータルの組成式  $Ru_A Pt_B Rh_C Cr_D Ir_E O_F$  を計算し助触媒組成式として特徴量化した。触媒組成式と助触媒組成式は Xenonpy ライブラリ [2] によって数値化し、機械学習モデルの説明変数化した。

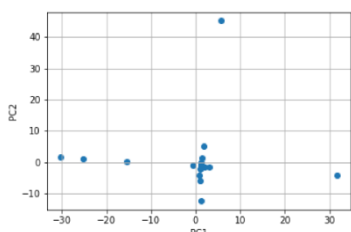


図 2 説明変数の主成分分析。  
実験設定としたハズレ値が存在することがわかる。

Xenonpy によって生成した説明変数の次元は数百におよぶものの、実験データは十分に収録されていないため、説明変数の次元を削除し、同時にハズレ値を同定するために主成分分析を行って可視化した (図 2)。このことから、データには実験設定として説明変数の空間では外れ値があることがわかった。以降、これらの外れ値を除くことで機械学習モデルを構築した。ここでは、実験データを直接に学習することで理論化学計算のみでは不可能な光触媒活性 (水素生成量、Hydrogen Evolution Rate, HER) の定量的な予測を行った。モデルには Support Vector Regressor を採用し、ダブルクロスバリデーション法によって、その精度を可視化した結果、約  $3.6 \mu M/h$  の精度で予測が可能であることがわかった (図 3)。

さらに、本項目では、サイバー・フィジカルループを確立するために、Y 元素を用いた YTOS の光触媒について共同研究者 (堂免・久富グループ) と協力して実験データ収集フォーマットを確定した。今後は YTOS の実験データに理論化学計算結果を同化することで、光触媒活性の予測精度を向上させることを行う。

[1] “Enhanced Overall Water Splitting by a Zirconium-Doped  $TaON$ -Based Photocatalyst”, K. Domen et. al. *Angew Chem Int Ed Engl.* 2022 Apr 19;61(17):e202116573

[2] <https://xenonpy.readthedocs.io/en/latest/>

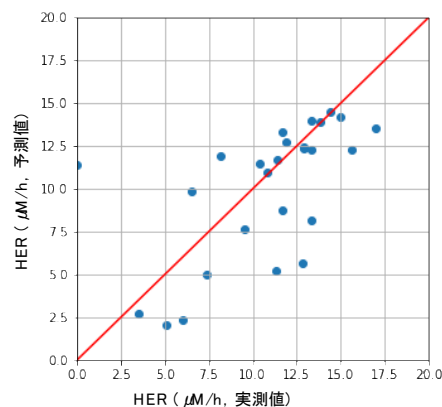


図 3 光触媒活性 (水素生成量、Hydrogen Evolution Rate, HER) の定量的な予測。予測誤差 (RMSE):  $3.62 (10^{-6} M/h)$ 。

## (7) プロジェクトの総合的推進

2-3. に記載のとおりシンポジウム・ワークショップの開催を通し、プロジェクトを総合的に推進した。

### 2-3. 活動（研究会の活動等）

- ・本事業メンバーを中心に EU-Japan workshop on HPC-based material sciences（令和3年11月9-10日）を開催。参加者数40名。
- ・「富岳」加速プログラム材料系で合同研究会（令和3年12月8-9日）を開催。
- ・本プロジェクト公開シンポジウム（令和4年月17日）を開催。登録者数170名。

### 2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) ハイスループット・シミュレーションによる新規太陽電池材料の設計	理化学研究所	中嶋隆人
(2) 高効率・高耐久な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計	理化学研究所	中嶋隆人
(3) 水素製造のための可視光応答光触媒の開発	神戸大学	天能精一郎
(4) 感染症対策としての高機能光触媒の開発	神戸大学 京都大学	天能精一郎 山下晃一
(5) 太陽光エネルギー変換デバイスの高効率化と実用化に向けた材料設計	京都大学	山下晃一
(6) AI とサイバー・フィジカルシステムの構築	奈良先端科学技術大学院大学	藤井幹也
(7) プロジェクトの総合的推進	理化学研究所	中嶋隆人

#### 別添1 学会等発表実績

理化学研究所

1. T. Nakajima, K. Hirao, B. Chan, “Higher-order transition state approximation”, J. Chem. Phys. 156, 114112 (2022). 10.1063/5.0086173
2. 中嶋隆人, “「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現”, PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会、オンライン、2022年2月15日。
3. 中嶋隆人, “「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現”, 第13回材料系ワークショップ、オンライン、2022年2月9日。
4. T. Nakajima, “Realization of Innovative Light Energy Conversion Materials utilizing the Supercomputer Fugaku”, 4th R-CCS International Symposium, online, 7 Feb. 2022.
5. T. Nakajima, “Molecular Simulation: Towards Fugaku”, PACIFICHEM2021, online, 21 Dec. 2021.

京都大学

1. Electron-phonon Interaction and Fröhlich Polaron Diffusion of Ferroelectric Perovskite Materials, Koichi Yamashita, Masanori Kaneko, APS March Meeting, Chicago, online, 15 March 2022.
2. 強誘電性ペロブスカイト材料の電子-フォノン相互作用とフレリッヒ・ポーラロン拡散、山下晃一、金子正徳、分子科学討論会、札幌、オンライン、2021年9月18-21日。