

特別講演

□第191回春季講演大会学術貢献賞(浅田賞)受賞記念
特別講演(2026年3月13日)

実験パラメータに依存しない 階層計算技術による構造材料設計

Design of Structural Materials by a Multi-scale Simulation
without Experimental Parameter

佐原亮二
Ryoji Sahara

物質・材料研究機構
構造材料研究センター
計算構造材料グループ
グループリーダー



*脚注に略歴

1 はじめに

2050年カーボンニュートラル社会の実現に向けて、第一原理計算やマルチスケールシミュレーションに基づき、新しい構造材料や機能材料の短期開発が望まれている。一般に高温における構造材料は、鉄鋼材料に限らず、年単位という長期的な使用が想定されており、構造材料の耐用温度向上や軽量化、長寿命化は、早急に取り組むべき重要な課題である。また機能材料には、グリーン社会を支えるため従来の特性を超えた新機能の発現や、感染症に強い社会実現のための生体材料・医療材料としての機能が求められる。その際、実験・観察結果から導き出された現象論ではなく、ナノスケールの信頼性の高い第一原理計算に立脚して、材料の機械的特性予測・向上やプロセス技術の高度化に繋げる成果を得ることが必要である。計算機の発展はめざましく¹⁾、それに伴った基礎理論の発展と数値計算手法の開発および、それによる構造材料や機能材料の様々な特性解明の研究には目を見張るものがある。一方、これらの実用材料は、系を構成する要素の局所的な特性が空間的・時間的にどのように分布しているかがマクロな特性を制御する鍵である。これを扱うためには、第一原理計算で扱える原子数には、やはり限界がある。そのため、第一原理計算により得られた系の特徴的な物理量をマクロなスケールへ変換し橋渡しする計算技術の構築が求められる。

我々の研究グループでは、密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT)²⁾ に基づく第一原理計算と粗視化

計算技術を合わせた計算技術を、幅広い構造材料や機能材料開発に適用し、その設計指針を理論的に示し、共同研究者の実験家と共に新材料開発を進めている。このようなマルチスケールシミュレーションは、標準的な第一原理計算のみでは扱えない大きな空間・時間スケールにわたる。図1に、我々の研究グループで進めているマルチスケールシミュレーションによる構造材料設計の概念図を示す。空間・時間スケールが一番小さい領域の第一原理計算から熱力学計算を経て、マクロなフェーズフィールド法までをカバーしている。本稿では我々の一連の研究から、第一原理計算による合金状態図予測、第一原理計算の粗視化と第一原理フェーズフィールド法による微細組織予測、全電子GW計算による電子状態解析とそのダイナミクスへの拡張について、簡単に紹介したい。なお、本稿では紙面の都合上、第一原理計算の基礎については省略するので、参考文献³⁾等を参照されたい。

2 第一原理計算による合金状態図予測

合金状態図は、全ての合金開発プロセスにとって必要不可欠なツールである。通常、合金状態図は計算熱力学 (CALPHAD) 法に基づき熱力学データベースを参照して計算されるため、熱力学データベースの構築には膨大な時間とコストがかかり、データベースに含まれる限定的な実験データの精度に結果は依存するという問題を有する。本研究ではこのような現状を改善すべく、第一原理計算のみで合金状態図を決定した。本研究では、合金の自由エネルギーを、電子

* 2000年3月に東北大学工学研究科博士課程後期3年の課程を修了し、博士(工学)を取得した。同年東北大学大学院工学研究科助手、2012年東北大学金属材料研究所准教授を経て、2013年物質・材料研究機構に入所、現在に至る。

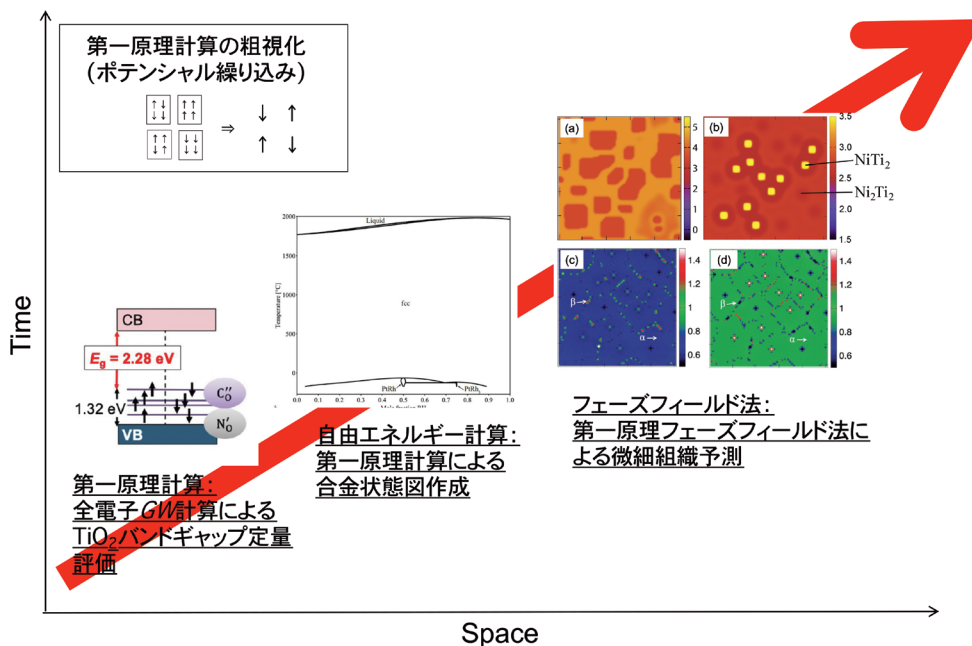
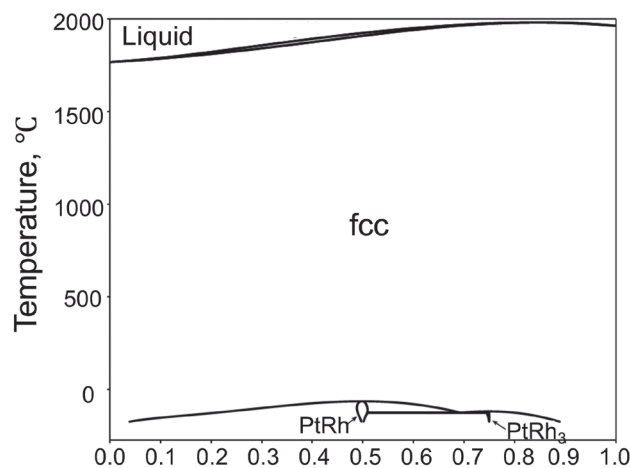


図1 マルチスケールシミュレーションによる構造材料設計の模式図 (Online version in color.)

系のエネルギー、混合エントロピーの寄与、格子振動の寄与、電子の熱励起の寄与、さらに磁性を有する場合はスピン配置の寄与の和として評価する。本研究では混合エントロピーの寄与はBragg-Williams近似⁴⁾で、格子振動の寄与は調和近似で評価した。第一原理計算の遂行にはVienna Ab initio Simulation Package (VASP)^{5,6)}を使用した。また固溶体のランダム原子配置にはSQS (Special Quasirandom Structure) モデル^{7,8)}を使用した。系の全自由エネルギーへの寄与は、フォノン計算から評価される格子振動の寄与が大きい。様々な組成と結晶構造、原子配置に対して自由エネルギーを求め、得られた結果をCALPHADの関数形に落とし込み、最終的に状態図を決定した。例として図2に、本計算で求められたPt-Rh合金の状態図を示す⁹⁾。Pt-Rh合金は、1400℃という超高温における熱力学データは限られており、さらに弾性特性などの実験値がほとんど無いというのが現状である。本計算で得られた状態図をMatNavi¹⁰⁾などの実験状態図と比較すると、実験を良く再現できていることが確認された。また得られた熱力学データは、超高温領域において、有限要素法による弾塑性解析に適用することができる¹¹⁾。我々のグループでは、Pt-Rh合金の他にもAl-Nb-Ni合金¹²⁾やAl-Ni-Ti合金¹³⁾でも同様の状態図計算を行っている。

本計算はスーパーコンピュータを用いても数ヶ月かかる。そこで、第一原理計算を機械学習ポテンシャルで置き換える事による計算の高速化を行った。近年は様々な機械学習ポテンシャルが提案されているが、本研究では、Preferred

図2 第一原理計算により決定したPt-Rh合金状態図⁹⁾

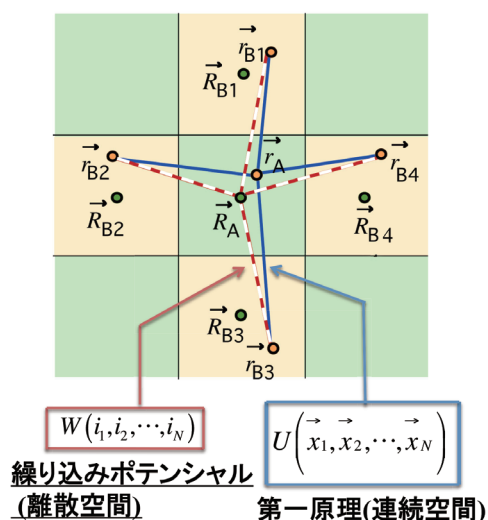
Networksが開発を進めている機械学習ポテンシャル¹⁴⁾を利用した。その結果、第一原理計算で状態図を決定する場合と比較して、100倍以上の高速化が確認された⁹⁾。つまり、機械学習ポテンシャルを介しているとはいえ、数日間で実験パラメータフリーで合金状態図が決定できる事が示された。なお、機械学習ポテンシャルの精度の検証は注意深く行う必要がある。今後、このような計算により予備的な熱力学データベースを迅速に構築することで、必要な実験データ数を減らすことが期待される。

3 第一原理計算の粗視化と 第一原理フェーズフィールド法による 微細組織予測

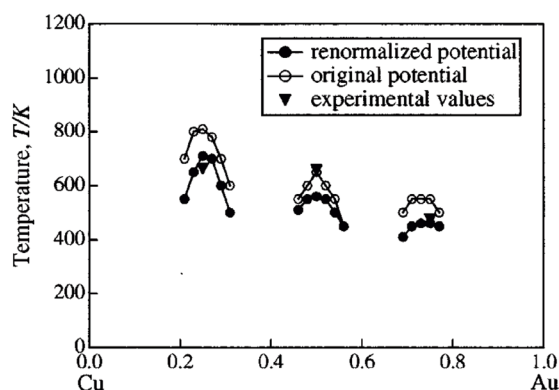
有限温度における系のマクロな振る舞いの解析は、系の状態の本質的理解に重要である。多数の原子・分子の集合体である系を考えると、その集合の仕方によって系は様々な振る舞いを示し、その系の持つ巨視的な性質は原子・分子の世界で成り立つ量子力学とは、かなり形を変えたものになる。そのため、微視的な原子・分子の性質が与えられたものとして、巨視的な観測結果を導くことが重要になる。この場合の計算方法として、原理的には系の構成要素1つ1つの動きを決定論的に計算する分子動力学 (molecular dynamics, MD) シミュレーションが考えられるが、MDシミュレーションを実行できる空間・時間には制約があり、拡散型相転移を示す合金の熱平衡状態を扱うことなどは困難である。一方、格子気体モデル (lattice-gas model、以下、格子モデル) は取り扱いが比較的簡便であり、この解析に適している。格子モデルは、連続空間を格子に区切り格子上に粒子やスピンを配置するモデルであり、これを用いた計算手法としてモンテカルロ法¹⁵⁾やクラスター変分法^{16,17)}が挙げられる。これらの手法を用いた研究はこれまでに多大な成功を収めている一方、材料科学の立場から見ると単純すぎるものも多く、実験との間に大きな隔たりが生じる。例えば、格子モデルで用いる相互作用パラメータの物理的な正当化が困難になり、実験結果と計算との定量比較が困難になる、あるいは、第一原理計算で格子モデルの相互作用を決定したとしても相転移温度が高く見

積もられる、非現実的な相転移が起こる、等の不都合が生じる。これは、異なるサイズの原子が不規則に混合されている場合、実際には原子の位置が完全結晶の格子点位置から大きく緩和するため、この緩和を無視して格子上に原子を固定した計算では不規則相のエネルギーが高めに計算され、その結果、規則相が実際よりも相対的に安定したことによる、と考えられる¹⁸⁾。

本研究では上記の問題を解消するため、ナノスケールの第一原理計算と、より粗視化されたモデル計算を橋渡しする粗視化の手法「ポテンシャル繰り込み理論」を提案しており、これを格子モンテカルロ法^{19,21)}やフェーズフィールド法²²⁻²⁵⁾へ適用してきた。繰り込み (Renormalization) は、統計力学においては、二次相転移の臨界挙動に対する普遍的な臨界指数、スケール則を定式化する方法として、Wilsonにより導入された^{26,27)}。その基本的な考え方は、系の短距離の自由度を消去することによって、より長距離の粗視化された描像を得ることである。我々の手法のポイントは、図3 (a) に示すように、格子定数より短い長さのスケールの自由度を消去することで、連続空間における相互作用 (図の実線) を離散空間での相互作用 (図の格子点からの点線) で代表させることである。具体的には、注目した格子内の部分分配関数に関する積分を行う。得られたエネルギーのクラスター展開²⁸⁾によりDFTベースの「局所自由エネルギー」を求める。これを「繰り込みポテンシャル」と呼ぶ。得られた (粗視化された) 局所自由エネルギーは、各温度で周囲の原子の種類と配置の関数として求められる。図3 (b) にその研究例として、繰り込みポテンシャルを用いたモンテカルロ法により得られた典型的



(a)



(b)

図3 (a) 第一原理計算の粗視化の手続きの模式図²⁰⁾。(b) 繰り込みポテンシャルを用いた格子モンテカルロ法により求めたCu-Au合金状態図²¹⁾ (Online version in color.)

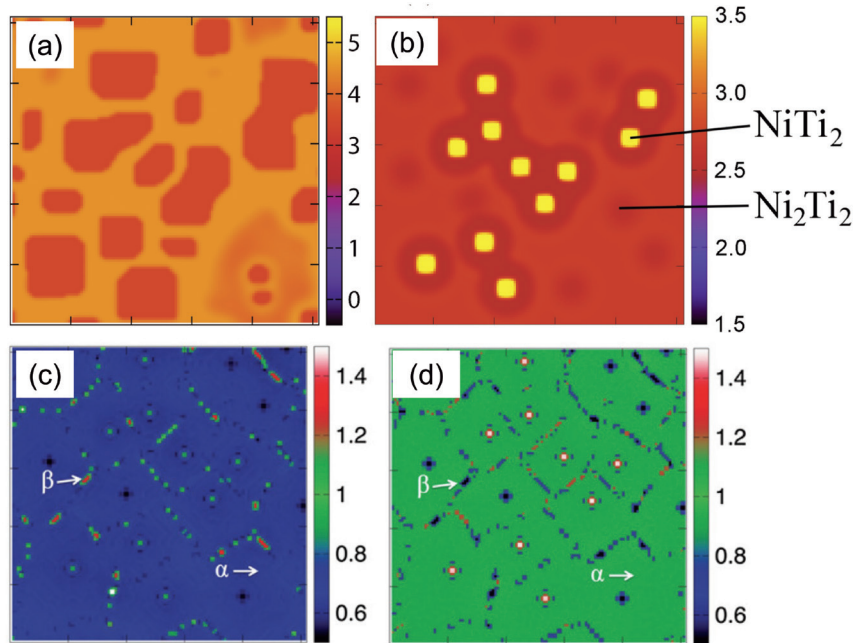


図4 第一原理フェーズフィールド法により求めた (1) Ni-Al 合金²²⁾、(b) Ni-Ti 合金^{23,24)}、(c) (d) Ti64 合金の微細組織²⁵⁾ の例 (Online version in color.)

な規則不規則相転移を示す Cu-Au 合金の状態図を示す^{20,21)}。繰り込みポテンシャルを用いる事で、これを用いない場合に比べて相転移温度が低下し、概ね実験値を再現することが確認された。なおこの研究では、第一原理計算の膨大な計算量を削減するため、Acklandらにより提案された古典MDシミュレーションで用いられる経験的ポテンシャル^{29,31)}を用いた。

さらに本手法をフェーズフィールド法へ拡張した「第一原理フェーズフィールド法」(first-principles phase field、以下 FPPF) により、合金の微細組織を予測した。FPPFにおいては、先述の手続きによりDFTベースのポテンシャルテーブルを元素 X の濃度 ϕ_X の関数として求めて、それを用いてCahn-Hilliard方程式を解く。この一連の手続きにより、ナノスケールのDFTとマクロスケールのフェーズフィールド法を連結する。

図4はFPPFの結果の例である。図4 (a) はNi-Al 合金 (82at. % Ni 合金) の1300Kにおける結果である²²⁾。これは実験で得られた微細組織³²⁾を良く再現する。この組成を含め様々な組成で計算を行い、状態図の単相領域や二相共存領域に対応した様々な微細組織が得られた。図4 (b) はNi-Ti 合金の1200Kにおける結果^{23,24)}である。この場合も実験³³⁾を良く再現することを確認した。図4 (c) と (d) は耐熱チタン合金であるTi-6Al-4V (Ti64) 合金の1253Kにおける (c) V濃度分布と (d) Al濃度分布であり²⁵⁾、実験³⁴⁾を良く再現する。最近では、室温を含む低温領域へと本手法の拡張を進めている³⁵⁾。

表1 アナターゼ型TiO₂のバンドギャップの比較^{39,40)} (Online version in color.)

	×	△	○	
	DFT	GW (valence)	GW (all-electron)	Experimental
Band gap, E_g / eV	2.08	3.56	3.49	3.2 (at 300 K) 3.3 (at 5 K)

※実験値に励起子効果($\sim 0.3\text{eV}$)[40]を加えると計算値(GW(all-electron))に対応する

4 全電子GW計算による電子状態解析とそのダイナミクスへの拡張

得られた微細組織に対応する詳細な電子特性解析には、DFTは精度が足りない場合がある。例えばDFTは半導体のバンドギャップを過小評価することが広く知られている。これを解決するため我々は、多体摂動論 (many-body perturbation theory, MBPT)³⁶⁾に基づいた全電子GW計算を行った。ここでGW計算³⁷⁾とは、第一原理計算の枠組みで多体電子相関を精密に取り込む計算手法である。計算は非常に重い、得られる計算結果の精密性と信頼性が広く認知されている。この第一原理計算プログラムにはTOMBO (Tohoku Mixed Basis Orbitals ab initio program)³⁸⁾を用いた。本プログラムは全電子混合基底法に基づいており、原子に局在した原子軌道関数と空間的に一様に広がる平面波の混合基底で一電子波動関数を記述する (混合基底) ため、比較

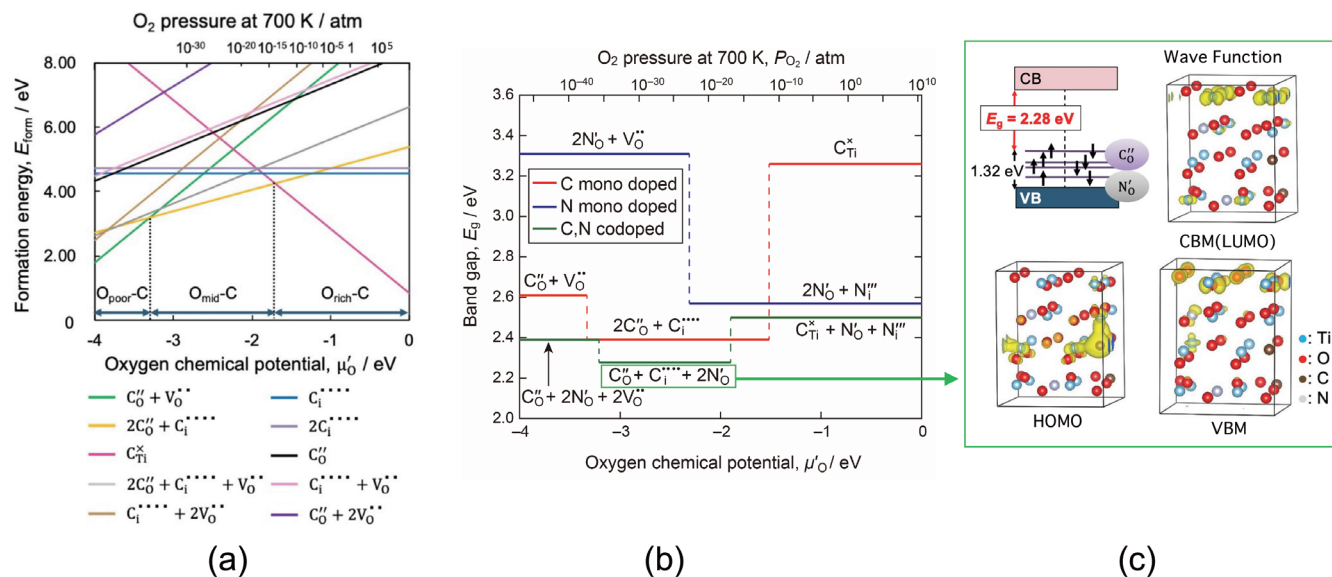


図5 (1) 様々なC添加アナターゼ型TiO₂モデルの相安定性の酸素分圧依存性 (700K)。(b) 安定なC添加、N添加、C、N共添加アナターゼ型TiO₂モデルのE_gの酸素分圧依存性。(c) E_gが最小であるC、N共添加モデルにおけるE_g狭窄メカニズム³⁹⁾ (Online version in color.)

的少ない波動関数で内殻電子と価電子の両方(全電子)を効率良く記述することが可能である。表1に、純アナターゼ型TiO₂のバンドギャップ(E_g)の比較を示す³⁹⁾。DFTや価電子のみを扱うGW計算と比べて、全電子GW計算は実験値を定量予測することが示される。

ここでは、本手法を軽元素(C、N)添加アナターゼ型TiO₂のE_g計算に適用し、E_g定量予測とその狭窄メカニズムを明らかにした研究³⁹⁾について紹介する。その工学応用として、C、N添加による可視光応答型抗菌機能を有する生体用構造材料開発が挙げられる⁴¹⁾。なお純TiO₂は紫外線応答を示す⁴²⁾。本研究では、はじめに侵入型や置換型を含む様々なC、N添加アナターゼ型TiO₂モデルを構築し、その相安定性を欠陥種の生成条件(酸素分圧、温度)の関数として評価した。その結果、700KにおけるC添加モデルについて、図5(a)に示すように、酸素分圧に依存して3つの安定なモデルが求められた。N添加、C、N共添加モデルの場合も同様に安定なモデルを決定した。次に、これらの安定なモデルに対して全電子GW計算を行い、E_g定量評価とその狭窄メカニズムを明らかにした。図5(b)は、全電子GW計算によるC、N添加アナターゼ型TiO₂のE_g定量予測の結果である。酸素分圧(あるいは酸素ポテンシャル)に依存して、様々なE_gを示す。本研究で計算したモデルの中でE_gが最も小さいモデルは、中程度の酸素分圧下におけるC、N共添加モデルである。そのE_gは2.28eVであり、可視光応答を示す。図5(c)にE_g狭窄メカニズムを示す。置換型のCとNが不純物準位を形成することによるE_g狭窄が明らかになった。さらに図5(c)には、HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital、最高被

占軌道)、CBM(Conduction Band Minimum、伝導帯下端)(LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital、最低空軌道))、VBM(Valence Band Maximum、価電子帯上端)の波動関数を各々示している。

最後に、全電子GWをダイナミクスへ拡張した、電子励起状態を考慮した第一原理分子動力学シミュレーションによる研究^{43,44)}について簡単に述べる。現在標準的に行われている第一原理分子動力学シミュレーションはDFTに基づくため、電子励起経由での化学反応、例えば触媒反応など、を正しく記述できない。本研究では拡張準粒子理論⁴⁵⁾に基づき、電子励起状態を取り扱うことが可能なGW計算を採用した第一原理分子動力学シミュレーション(時間依存GW(Time Dependent GW, TDGW))を実現した。これにより、水素社会の基盤となる水素生成法の一つであるメタン分子からの水素生成の基礎過程を追跡した。TDGWは非常に大規模計算であり、現状ではスパコンを駆使しても小規模分子しか扱えない。しかしその応用先として、航空宇宙分野における極超音速飛行エンジン冷却システムの効率化が挙げられる。我々は、炭化水素燃料の熱分解吸熱反応によるエンジン冷却とその触媒による高効率化を、実験との連携により進めている⁴⁶⁾。

最後に

本稿では、我々の研究グループで進めている第一原理計算を基盤にしたマルチスケールシミュレーションによる材料開発の例を紹介した。これらの計算は高精度である一方、計算規模が大きく、計算機の発展に支えられている。このような

高精度な計算を前提とした上で、次にデータ駆動型研究の解析能力やパターン認識の強みを組み合わせる事による材料開発研究の重要性が高まってゆくと考えられる。

なお、本稿で紹介した一連の研究は、私ひとりではなく非常に多くの研究者との共同研究の成果です。ここに感謝の意を示します。

参考文献

- 1) <https://top500.org>
- 2) P.Hohenberg and W.Kohn : Phys. Rev., 136 (1964), B864. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- 3) 大野かおる 編著, 中村振一郎, 水関博志, 佐原亮二 共著 : 計算ナノ科学 第一原理計算の基礎と高機能ナノ材料への適用, 近代科学社, (2019).
- 4) W.L.Bragg and E.J.Williams : Proc. Roy. Soc. London A, 145 (1934), 699.
- 5) G.Kresse and J.Furthmüller : Comput. Mater. Sci., 6, (1996), 15. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- 6) G.Kresse and J.Hafner : Phys. Rev. B, 47 (1993), 558. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
- 7) A.Zunger, S.-H.Wei, L.G.Ferreira and J.E.Bernard : Phys. Rev. Lett., 65 (1990), 353. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.353>
- 8) A.van de Walle, M.Asta and G.Ceder : Calphad, 26 (2002), 539. [https://doi.org/10.1016/S0364-5916\(02\)80006-2](https://doi.org/10.1016/S0364-5916(02)80006-2)
- 9) A.Saengdeejing, R.Sahara, Y.Kawazoe, K.Higashino, H.Kino and T.Chikyow : The 11th General Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science, I-62 (2025).
- 10) Mat Navi, <https://mits.nims.go.jp>
- 11) 東野和幸, 佐原亮二, A.Saengdeejing, 中村秀一, 原田修, 鈴木芳雄, 高間茂樹 : 第69回宇宙科学技術連合講演会講演集, 1K06 (2025).
- 12) A.Saengdeejing, R.Sahara and Y.Toda : Science and Technology of Advanced Materials:Methods, 4 (2024), 2412968. <https://doi.org/10.1080/27660400.2024.2412968>
- 13) A.Saengdeejing, R.Sahara and Y.Toda : Calphad, 84 (2024), 102658. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2023.102658>
- 14) S.Takamoto, C.Shinagawa, D.Motoki, K.Nakago, W.Li, I.Kurata, T.Watanabe, Y.Yayama, H.Iriguchi, Y.Asano, T.Onodera, T.Ishii, T.Kudo, H.Ono, R.Sawada, R.Ishitani, M.Ong, T.Yamaguchi, T.Kataoka, A.Hayashi, N.Charoenphakdee and T.Ibuka : Nat. Commun., 13 (2022), 2991. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-30687-9>
- 15) K.Binder and D.W.Heermann : Monte Carlo Methods in Statistical Physics : An Introduction, Springer Science & Business Media, (2010).
- 16) R.Kikuchi : Phys. Rev., 81 (1951), 988. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.81.988>
- 17) 菊池良一, 毛利哲雄 著 : クラスター変分法, 森北出版, (1997).
- 18) T.Horiuchi, S.Takizawa, T.Suzuki and T.Mohri : Metall. Mater. Trans. A, 26 (1995), 11. <https://doi.org/10.1007/BF02669790>
- 19) K.Ohno, K.Esfarjani and Y.Kawazoe : Computational Materials Science : From Ab Initio to Monte Carlo Methods, 2nd ed., Springer (2018).
- 20) H.Ichikawa, R.Sahara, H.Mizuseki, K.Ohno and Y.Kawazoe : Mater. Trans. JIM, 40 (1999), 911. <https://doi.org/10.2320/matertrans1989.40.911>
- 21) R.Sahara, H.Ichikawa, H.Mizuseki, K.Ohno, H.Kubo and Y.Kawazoe : J. Chem. Phys., 120 (2004), 9297. <https://doi.org/10.1063/1.1704633>
- 22) S.Bhattacharyya, R.Sahara and K.Ohno : Nat. Comm., 10 (2019), 3451. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11248-z>
- 23) K.Ohno, M.Tsuchiya, R.Kuwahara, R.Sahara, S.Bhattacharyya and T.N.Pham : Comput. Mater. Sci., 191 (2021), 110284. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110284>
- 24) A.Gollapalli, R.Sahara, K.Ohno, R.Kuwahara and A.Kr.Singh : accepted to Modell. Sim. Mater. Sci. Eng., (2026).
- 25) T.N.Pham, K.Ohno, R.Sahara, R.Kuwahara and S.Bhattacharyya : J. Phys. : Cond. Matt., 32 (2020), 264001. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab7ad5>
- 26) K.G.Wilson : Phys. Rev. B, 4 (1971), 3174. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.4.3174>
- 27) K.G.Wilson : Phys. Rev. B, 4 (1971), 3184. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.4.3184>
- 28) J.W.D.Connolly and A.R.Williams : Phys. Rev. B, 27 (1983), 5169. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.5169>
- 29) G.J.Ackland and V.Vitek : Phys. Rev. B, 41 (1990), 10324. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.10324>
- 30) G.J.Ackland, G.Tichy, V.Vitek and M.W.Finnis : Philos.

- Mag. A, 56 (1987), 735. <https://doi.org/10.1080/01418618708204485>
- 31) H. Deng and D.J. Bacon : Phys. Rev. B, 48 (1993), 10022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.10022>
- 32) D. Li, K. Kishida, M. Demura and T. Hirano: Intermetallics, 16 (2008), 1317. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2008.09.001>
- 33) A. Školáková, P. Novák, P. Salvetr, H. Moravec, V. Šefl, D. Deduytsche and C. Detavernier: Metallur. Mat. Trans. A, 48 (2017), 3559. <https://doi.org/10.1007/s11661-017-4105-y>
- 34) S. Huang, J. Zhang, Y. Ma, S. Zhang, S.S. Youssef, M. Qi, H. Wang, J. Qiu, D. Xu, J. Lei and R. Yang : J. Alloys Compd. 791 (2019), 575. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.03.332>
- 35) R. Dahule, A. Gollapalli, A. K. Singh, A. Saengdeejing, T. Chikyow, R. Sahara and K. Ohno : APS Global Physics Summit, Session MAR-U43 Presentation No.7, (2026).
- 36) L. Hedin : Phys. Rev., 139 (1965), A796. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.139.A796>
- 37) M. S. Hybertsen and S. G. Louie : Phys. Rev. B 34 (1986) 5390. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5390>
- 38) S. Ono, Y. Noguchi, R. Sahara, Y. Kawazoe and K. Ohno : Comput. Phys. Commun., 189 (2015), 20. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2014.11.012>
- 39) T. Ishikawa, R. Sahara, K. Ohno, K. Ueda and T. Narushima : Comput. Mater. Sci., 220 (2023), 112059. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112059>
- 40) Y. Tezuka, S. Shin, T. Ishii, T. Ejima, S. Suzuki, S. Sato : J. Phys. Soc. Japan, 63 (1994), 347. <https://doi.org/10.1143/jpsj.63.347>
- 41) T. Ueda, N. Sato, R. Koizumi, K. Ueda, K. Ito, K. Ogasawara and T. Narushima: Dent. Mater., 37 (2021), e37. <https://doi.org/10.1016/j.dental.2020.10.009>
- 42) A. Naldoni, M. Altomare, G. Zoppellaro, N. Liu, S. Kment, R. Zbořil and P. Schmuki : ACS Catal., 9 (2019), 345. <https://doi.org/10.1021/acscatal.8b04068>
- 43) A. Manjanath, R. Sahara, K. Ohno and Y. Kawazoe : J. Chem. Phys., 160 (2024), 184102. <https://doi.org/10.1063/5.0202590>
- 44) A. Manjanath, R. Sahara, Y. Kawazoe and K. Ohno : Nanomaterials, 14 (2024), 1775. <https://doi.org/10.3390/nano14221775>
- 45) K. Ohno, S. Ono and T. Isobe : J. Chem. Phys. 146 (2017) 084108. <https://doi.org/10.1063/1.4976553>
- 46) <https://www.mod.go.jp/atla/funding.html>

(2026年4月10日受付)