JAIST Repository
https://dspace.jaist.ac.jp/

Title	北陸先端科学技術大学院大学　共有計算サーバ使用成果報告 2024
Author(s)	本郷, 研太; 小坂, 秀一; 田中, 琴子; 川瀬, 喜浩; 井口, 寧
Citation	Technical memorandum (Japan Advanced Institute of Science and Technology), TM-2025-001: 1-56
Issue Date	2025-09-01
Type	Others
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/19985
Rights	
Description	テクニカルメモランダム（北陸先端科学技術大学院大学）

JAIST
JAPAN
ADVANCED INSTITUTE OF
SCIENCE AND TECHNOLOGY

Japan Advanced Institute of Science and Technology

北陸先端科学技術大学院大学

共有計算サーバ使用成果報告 2024

本郷 研太, 小坂 秀一,
田中 琴子, 川瀬 喜浩, 井口 寧　編

2025 年9 月1 日
TM-2025-001

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
〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

要旨

本報告は北陸先端科学技術大学院大学において，学内で共同利用されている計算サーバや並列計算機を用いて，2024 年度に行われた先端的諸研究の概要および発表論文について，各利用者の協力に基づいて報告を頂き，一編の報告書として取りまとめたものである.

目次

1. JAIST における共有計算サーバー環境 1

2. 情報科学分野の計算サーバー利用研究 8

物質科学シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクス
本郷研太

Diffusion Monte Carlo Study of High-Pressure Solid Hydrogen Phase
Putu Bhargo Abhimana Chrysnanda

第一原理計算による固体電解質の合成経路評価
酒井拓

DFT Study on Li Vacancies Stability in $LiCoO_2$ based on Cluster Expansion Model
SUMBOWO, Joel Fredericko

ハイエントロピー合金の$L1_2$, $D0_{23}$および$D0_{22}$ 規則-不規則共存構造の価電子濃度依存性
水関博志, 本郷研太

Superconductivity in o-MAX phases
Mohammad Khazaei, Kenta Hongo

Prediction of Phase Formation of Quantum Materials Using Experimental Data and Machine Learning
Yoichi Higashi, Sonosuke Kono, Ryo Maezono, Kenta Hongo

ニューラルネットワークポテンシャルを用いた酸化物固溶体の固液相境界の研究
市場友宏

デラフォサイトがホストするハニカム相とカゴメ相の予測
市場友宏

無秩序なイオン配置パターンに伴う複数のCe^{3+}の発光スペクトル
市場友宏

Understanding Interface Behavior in SnS/ZnS Heterostructures: Stability and Electronic Properties
Rohit Dahule

Data-Driven Discovery of Polymer Crystals with High Thermal Conductivity through Physics-Informed Screening
Rohit Dahule, Ryo Maezono, Kenta Hongo

DFT and QMC analysis on Mn-based metal-organic framework for CH_4 partial oxidation reaction

SUKANLI, Reza Pamungkas Putra

第一原理拡散モンテカルロ法による $NiPd(CN)_4$ の磁気・構造相転移解析

藤丸竜之介

Computational Design of Novel Superconducting Hydrides and Functional Materials

PENG SONG, Kenta Hongo, Ryo Maezono

Thermodynamic assessment of Ta-N-(Hf/O) systems using the CALPHAD approach

Niraja Moharana, Ryo Maezono

Mechanistic Investigation of CH_4 to CH_3OH Conversion on Graphene-based Metal-Dimmer Catalyst

Muhammad Haris Mahyuddin, Kenta Hongo, Ryo Maeozno

ガスセンサ応用に資する無機蛍光体の蛍光変調能の研究

半谷泰生, 本郷研太, 前園涼

Atomic-Scale Insights into Gas and Liquid Structure and Reactivity at Transition Metal Oxides Interface for Battery and Energy-related Application

Mohammad Kemal Agusta, Ryo Maezono

窒化チタン薄膜の電子輸送特性

瀧口耕介, Y. Krockenberger, 谷保芳孝, 山本秀樹, 市場友宏, 本郷研太, 前園涼

Research title: Theoretical Study of Sodium Atom Diffusion in Ti_3C_2 Using Density Functional Theory for Sodium-Ion Battery Applications

Mohaddeseh Abbasnejad, Tom Ichibha, Ryo Maezono

層状物質 WTe_2 の超伝導特性の層間距離依存性に関する研究

佐藤和輝, 谷林慧, 本郷研太, 前園涼

Enhancing Semantic Analysis through Instruction Fine-Tuning of LLMs

NGUYEN, Phuong Minh

Advancing Large Language Model Efficiency through Pruning and Speculative Decoding

Do Dinh Truong

Mechanistic Interpretability on Modern Large Language Models

趙羽風

メタン酸化カップリング反応に有用な触媒の機械学習を用いた探索

谷口稜, 崎間寛哉

Large Language Model-based cybersecurity research
MAI, Trong Khang

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバー利用研究 39

機械学習ポテンシャルによる Ziegler-Natta 触媒に関する研究
筑間弘樹

Ab initio modeling of the heterogeneous Ziegler-Natta catalyst via machine learning
筑間弘樹, João Marcos da Silveira

特徴量設計技術に基づく機械学習を用いたメタン酸化カップリング触媒の開発
藤原綾

Influence of Humidity on Layer-by-Layer Growth and Structure in Coordination Networks
Yuki Nagao, Kentaro Aoki

ポリマー1 分子の直視 ポリ擬ロタキサン鎖一本の高速 AFM イメージング
堀諒雅, 篠原健一

分子動力学シミュレーションを用いた脂質フリップを誘起する膜貫通ペプチド二量体の膜内構造解析
齋藤大明

First-principles studies on the stability mechanisms of monolayer 1H-XS2 with mixed transition metal elements based on density functional theory
Chi-Cheng Lee

Zeeman 効果を利用したスピンデバイスに関する研究
小松颯, 赤堀誠志

相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究
佐野陽之, 安東秀

分子シミュレーションを活用した糖鎖-タンパク質相互作用のダイナミクスの解析
山口拓実

4. 謝辞 51

1. JAIST における共有計算サーバ環境

1.1 概要

北陸先端科学技術大学院大学(JAIST)は，最先端の教育研究活動を支える研究基盤として全学共同利用な計算サーバ群を提供している．各ユーザーの研究活動に応じて，その目的達成に資するためには，柔軟な運用形態が求められる．情報社会基盤研究センター(以下情報センター)はソフト・ハード両面の保守業務を担っているが，ユーザー目線での運用を実現するために，情報センターとは独立な組織として「MPC グループ」と「MPC 管理グループ」が存在し，三者の親密な連携の上に運用されている．

MPC グループは共有計算サーバのユーザーから構成され，MPC 管理グループはその有志から構成される．MPC グループの登録ユーザーは，mpc メーリングリストを通じて，「計算機リソースやキュークラスに関する要望」や「各種共用ソフトウェアの利用に関する質問」など計算機利用に関する質問・要望を広く発言できる．

MPC 管理グループは，ユーザーの質問・要請に応え，キュークラス設定やリソース配分の具体案を提案し，ユーザー間の調整を行う．その提案に従い，情報センターが随時，設定を更新していく．情報センターと MPC グループ・MPC 管理グループの詳細は文献[9,10]を参照されたい．

1.2 システム構成

JAIST 共有計算サーバ環境は， HPC(High Performance Computing)-AI(Artifical Intelligence)研究用計算機システム“KAGAYAKI”（CPU/GPU）から構成される．本システムは，科学技術計算などの HPC 利用を想定した CPU 計算機ノードと AI・機械学習研究利用を想定した GPU 計算機ノードから構成されている

今年度は，汎用 PC クラスター計算機システムが昨年 2 月にサービス終了したため，KAGAYAKI システムのみの構成となっている(表 1)．図 1 に本システムの利用状況を示す．CPU・GPU 計算ノードともに利用率が高く，特に GPU 計算ノード は，2021 年度の更新以来，前システムから NVIDIA A100 系ノード 10 台と A40 系ノード 20 台へと大幅に増加したが，全ノードにおいて使用率はほぼ 100%であり，本学の AI/機械学習研究の需要[20-24]に応えることができたと考えられる。

表 1. JAIST で利用可能な計算サーバ群(2024)

KAGAYAKI システムCPU 計算ノード構成	
CPU ノード計算機	Dell PowerEdge R6525
CPU	AMD EPYC 7H12 2.6GHz 64Cores x 2 Sockets
メモリ	512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16)
ノード総数/全CPU 数/全コア数/主記憶容量	280 ノード/560 CPUs/35,840 Cores/143.3TB
総理論演算性能	1.48PFLOPS
開発環境(Fortran/C/C++)	GNU/Intel OpenAPI/AOCC
運用期間	2021年 3 月1 日～2026 年2 月28 日(予定)
KAGAYAKI システムGPU 計算ノード構成	
GPU ノード計算機(GPU-1 & GPU-2)	Dell PowerEdge R750
CPU	Intel Xeon Gold 5329 2.2GHz (26-core×2)
メモリ	512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16)
GPU-1/GPU-1 ノード総数	NVIDIA A100 x 2/10 ノード
GPU-2/GPU-2 ノード総数	NVIDIA A40 x 2/20 ノード
開発環境(Fortran/C/C++/Python)	GNU Complier, Intel OneAPI, Anaconda Python
運用期間	2022 年3 月1 日～2026 年2 月28 日(予定)

図 1. KAGAYAKI システムの年間利用状況：CPU ノード(上段)と GPU ノード(中段)の年間利用状況(2024 年 4 月～2025 年 3 月). 1 日毎の CPU/GPU 使用率の最大値を表示している.

1.3　アプリケーションソフトウェア

上記プラットフォームに対して，利用可能なアプリケーションソフトウェアを表 2 に示す．マテリアルサイエンス系の科学技術計算ソフトウェアとしては，Gaussian16/GaussView，及び Materials Studio の商用ソフトウェアを利用することができる．これらのソフトウェアは CPU 計算機上で並列計算として実行することができる．データ科学・機械学習などで利用可能なソフトウェアとしては，MATLAB(商用)が利用できる．また，Tensorflow，Pytorch などの公開されている各種ツール，フレームワークをコンテナとして計算機上に展開することができる．なお，これらのコンテナ環境は， CPU・GPU 両計算機上で実行することができる．

表 2. 各種ソフトウェアとプラットフォームの対応表(2024)

ソフトウェア	概略	KAGAYAKI		汎用 PC クラスター
		CPU	GPU	
Gaussian 16	Gaussian 社製の 量子化学計算パッケージ	○	−	○
GaussView	Gaussian 社製の Gaussian 専用可視化ソフト	○	−	○
Materials Studio	BIOVIA 社製の材料開発統合 シミュレーションソフトウエ	○	−	○
MATLAB	MathWorks 社製の 数値解析ソフトウェア	○	○	○
Tensorflow (コンテナ環境)	Google 社製の機械学習 ソフトウェアライブラリ	○	○	○
Caffe (コンテナ環境)	UCB 開発の 深層学習フレームワーク	○	○	○
Chainer (コンテナ環境)	Preferred Networks 開発の 深層学習フレームワーク	○	○	○

1.4　2024 年度の活動

2024 年度の JAIST 共有計算サーバ環境に関連する主な活動について述べる．例年，各種計算機の新規利用者開拓(オリエンテーション)，各種計算機利用者の技術レベルの向上，理解の促進を目的とし，各システム，ソフトウェアに関する利用者講習会(各種初級者講習会)を企画している．今年度も感染対策に関する本学対応方針に従うとともに，社会人学生にも参加しやすいよう昨年度に引き続き，ハイブリッド開催とした． 年間に開催した講習会の一覧を表 3 に示す．オリエンテーションでは，新入生や新規利用者を対象として，本学共有計算機の構成や初歩的な利用方法を解説した後に，ハンズオントレーニングを実施している．ハンズオントレーニングは，GUI 環境しか利用経験のないユーザーに対して， CLI 環境利用への心理的障壁を多少なりとも緩和し，本学での研究活動に向けて各種計算機の円滑利用を目的としている．そこで，Linux コマンド操作から始めて，ファイル編集，プログラムコンパイル，ジョブ投入といった計算機上での一連の作業を体験し，また本学で利用可能な科学技術計算ソフトウェアについても簡単な実

習を含めた講習内容となっている.

システム毎の講習会では，ログインからジョブ投入など初心者向けの内容から，並列化の理論と実行など中級者向けの内容まで，利用者のレベルに応じたテーマを用意している．2024 年度は，近年の機械学習に関する研究開発へのニーズの高まりに応じた大容量メモリの取り扱いに必要となるコンパイルオプションやジョブの実行法などに加え，利用者の多い Python 環境についても，Singularity コンテナにおける Python 仮想環境のローカル環境依存など重要な特性について解説し，理解を深めることに主眼をおいた．特に Singularity コンテナが計算環境の展開手段として一般的になりつつある昨今において，混乱を招きやすい Python 仮想環境との関連性を予め解きほぐし，理解を促すことが有効であると考えられる.

また今年度においても，本学で包括契約により全学サービスしている MATLAB の利用者拡大を目的に，MATHWORKS 社と本学学生アンバサダーからの尽力により MATLAB セミナーを実施することができた．今後も，本学でサービス提供しているソフトウェア全般に対して，利用状況と利便性の向上に向けた各種講習会を企画することで，新規利用者の拡大と効率的利用に取り組んでいく.

表 3. 2024 年度に開催した講習会

開催月	講習会
2024 年6 月17 日	大規模計算機利用オリエンテーション
2024 年6 月20 日	計算機講習会［KAGAYAKI:1］ ~ 計算機基礎編 ~
2024 年6 月21 日	計算機講習会［KAGAYAKI:2］ ~ コンテナ環境と GPU ~
2024 年9 月5 日	MATLAB ON THE GO - Creating portable applications with ease
2024 年10 月23 日	大規模計算機利用オリエンテーション
2024 年10 月29 日	計算機講習会［KAGAYAKI:1］ ~ 計算機基礎編 ~
2024 年10 月30 日	計算機講習会［KAGAYAKI:2］ ~ コンテナ環境と GPU ~

1.5 まとめと今後の導入計画

本報告「北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2024」は 2024 年度に情報センター提供の共有計算サーバを利用した研究の概要とその成果を報告している．mpc メーリングリストを通じて，MPC 管理グループと情報センターから本報告への寄稿依頼を行い，各著者のご厚意により，情報科学分野から 27 件，材料科学分野から 10 件と多彩な報告書を提出いただいた．ここに深く感謝申し上げる.

現在，最先端の科学・技術分野では，これまで計算機とあまり縁のなかった研究分野でも計算

機実験が容易に実施できるようになった．従って，最先端の計算機システムは，その一翼を担う高等教育機関として最先端の教育研究活動を開拓，実施，展開するための研究基盤として，その重要性を増している．本学におけるシステム利用状況の把握は，これまで実績のある研究分野に対するサポート強化だけではなく，新規利用実績のある研究分野を見出すことにもつながる．その結果として，本学における新しい教育研究展開の潮流を知ることができる．こうした教育研究展開の把握は，将来的には，次期計算サーバ導入時の重要な策定指針となり，より充実した計算機環境の構築に繋がるものと期待される．

本学における共有計算サーバの利用は，これまで科学技術計算の高速化・高精度化・大規模化を主務とする HPC 関連分野に集中していた．ところが近年の急速な AI 技術の隆盛に伴い，AI 技術とは接点のなかった研究分野においても，多かれ少なかれ AI 技術を取り入れる動きが加速し，そのような学際的研究が展開されている．寄稿報告を俯瞰すれば，今年度の利用実績が示唆するように，CPU ノードと GPU ノードを併せ持つ KAGAYAKI は，本学の教育研究インフラとして幅広い研究分野で利活用されており，従来の HPC 関連研究分野に加え，新たなニーズにも柔軟に対応できる計算機環境であるといえよう．共有計算サーバは，本学の先端的な教育研究活動をこれまで以上に躍進させる必須の教育研究基盤として，今後益々，その重要性が増していくものと期待される．今後も継続して，ユーザーに寄り添った高性能計算機システムサービスを提供できるよう，最新の研究動向をハードとソフトの両面で常に把握しながら，次期システム更新の選定指針を学内で広く議論していきたい．

KAGAYAKIシステムに加え，本学では計算資源の有効活用を目的に「研究クラウド基盤システム」を昨年度導入した．前者が大規模計算に適したバッチシステム環境であるのに対し，後者はルート権限を付与した開発・テストに適した柔軟な環境を提供している．両者を組み合わせて発展させることで，本学の教育研究における多様な要求に柔軟に対応できる計算システム環境の整備を進めている．

参考文献

[1] 佐藤 理史(編), ”JAIST における超並列関連研究：1992 年度-1993 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-94-0001, (1994).

[2] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究：1994 年度-1996 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-97-3, (1997).

[3] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究(1997 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-98-1, (1998).

[4] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(1998 年度-2000 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-003, (2002).

[5] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2001 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-004, (2002).

[6] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2002 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2003-001, (2003).

[7] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2003 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2004-002, (2004).

[8] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2004 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2005-001, (2005).

[9] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2007", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2008-002, (2008).

[10] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2008", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2009-001, (2009).

[11] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2009", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2010-001, (2010).

[12] 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2010", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2011-001, (2011).

[13] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2011", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2012-001, (2012).

[14] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2012", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2013-001, (2013).

[15] 佐藤 幸紀, 宮下 夏苗, 尾崎 泰助 (編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2013", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2014-001, (2013).

[16] 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), "北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告

2014”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム，IS-TM-2015-001, (2014).

[17] 井口 寧，本郷 研太，宮下 夏苗 (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2015-2016”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2018-001, (2018).

[18] 本郷 研太，辻 誠樹，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2017”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2018-002, (2018).

[19] 本郷 研太，辻 誠樹，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2018”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2019-001, (2019).

[20] 本郷 研太，辻 誠樹，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2019”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2020-001, (2020).

[21] 本郷 研太，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2020”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2021-001, (2021).

[22] 本郷 研太，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2021”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2022-001, (2022).

[23] 本郷 研太，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2022”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2023-001, (2023).

[24] 本郷 研太，宮下 夏苗，井口 寧, (編)，”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2023”，北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム，IS-TM-2024-001, (2024).

2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

物質科学シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクス

情報社会基盤研究センター 本郷研太

使用計算機: KAGAYAKI

今年度は、本学計算機群を利用した研究成果として、原著論文 13 件、解説記事 3 件、学会発表等 4 件(内招待講演 4 件)を報告した。第一原理計算を活用した材料物性解析やデータ駆動型構造探索手法による新規化合物の探索を行い、また新学術領域「複合アニオンの創製」に関する共同研究プロジェクトで 6 件の原著論文を報告している。これらの計算では、主として、KAGAYAKI 上にインストールされている VASP/Quantum Espresso を利用した。また、今年度は、本学マテリアルサイエンス系の実験グループとの学内共同研究の成果として原著論文を 3 件報告しており、うち 2 件は本学プレスリリース記事として紹介されている。

研究業績(原著論文・査読あり)

1) T. Hangai, T. Hasegawa*, X. Jian, N. Takayuki, T. Takeda, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, T. Goto, Y. Sato, A. Okawa, S. Yin, "Key Role of Metal-to-Metal Charge Transfer Transition between Mo^{6+} and Bi^{3+} for Enhancement in NIR Luminescence of Gd_2MoO_6:Bi,Yb Nanophosphor", **J. Phys. Chem. C** 128, 3351-3360 (2024).
2) P. Song, A. Durajski, Z. Hou, A. Ghaffar, R. Dahule, R. Szczesniak, K. Hongo, R. Maezono, "(La,Th)H_{10}: the Potential High-T_c (242 K) Superconductors Stabilized Thermodynamically below 200 GPa", **J. Phys. Chem. C** 128, 2656-2665 (2024).
3) T. Yasunaga, M. Kobayashi*, K. Oqmhula, H. Qi, T. Ichibha, K. Hongo, S. Yamamoto, R. Maezono, M. Mitsuishi, M. Osada, H. Kato*, M. Kakihana, "Multi-emission of Ce^{3+} from Single Crystallographic Site Induced by Disordering of Ions", **Inorg. Chem.** 63, 1288-1295 (2024).
4) S.P.K. Naik*, S. Alberto, K. Kataoka, Y. Gotoh, T. Ichibha, K. Hongo, R. Maezono, T. Nishio, H. Ogino*, "Single crystal growth and physical properties of La, Co doped (Eu,Ca)$FeAs_2$", **J. Cryst. Growth** 628, 127547:1-5 (2024).
5) T. Ichibha, Y. Nikaido, C. Bennett, J. Krogel, K. Hongo, R. Maezono, F. Reboredo, "Locality Error Free Effective Core Potentials for 3d Transition Metal Elements Developed for the Diffusion Monte Carlo Method", **J. Chem. Phys.** 159, 164114 (2023).
6) K.S. Qin∗, P. Song*, K. Hongo, R. Maezono∗, "First-Principles Investigation of Stability and Superconductivity in Ternary Yttrium-Praseodymium Hydrides under High Pressure", **J. Phys. Chem. C** 127, 21242-21249 (2023).
7) L. Wu, I. Saitoh, K. Hongo, K. Okeyoshi*, "Recognition of spatial finiteness in meniscus splitting based on evaporative interface fluctuations", **Adv. Mater. Interfaces** 10, 2300510:1-8 (2023). [JAIST プレスリリース: 2024/09/22]
8) C. Liu, K. Hongo, R. Maezono, J. Zhang*, Y. Oshima*, "Stiffer Bonding of Armchair Edge in Single-Layer Molybdenum Disulfide Nanoribbons", **Adv. Sci.** 10, 2303477 (2023). [JAIST プレスリリース: 2024/09/19]
9) T. Kato, Y. Iwasa, S.P.K. Naik, S. Ishida, Y. Higashi, I. Hase, T. Nishio, K. Hongo, R. Maezono, H.

Ogino*, "Structure, Optical, and Electrical Properties of Layered Oxychalcogenide $Sr_2ZnCu_2(S_{1-x}Se_x)_2O_2$ ($0 \leq x \leq 1$) Compounds", **Mater. Res. Express** 10, 095904 (2023).

10) R. Biyani, K. Hirata, K. Oqmhula, A. Yurtsever, K. Hongo, R. Maezono, M. Takagi, T. Fukuma*, M. Biyani*, "Biophysical Properties of the Fibril Structure of the Toxic Conformer of Amyloid-β42: Characterization by Atomic Force Microscopy in Liquid and Molecular Docking.", **ACS Appl. Mater. Interfaces** 15, 27789–27800 (2023).

11) D. Kato, P. Song, H. Ubukata, H. Taguro, C. Tassel, K. Miyazaki, T. Abe, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono*, H. Kageyama*, "Evolutionary Algorithm Directed Synthesis of Mixed Anion Compounds LaF_2X (X = Br, I) and $LaFI_2$.", **Angew. Chem. Int. Ed.** 62, e202301416 (2023).

12) P. Song*, M. Khawaguch, Y. Masubuchi, K. Oqmhula, K. Nakano, R. Maezono, K. Hongo*, "High-pressure phases of $BaCN_2$ explored using a genetic algorithm", **Comput. Mater. Sci.** 226, 112202 (2023).

13) A. Raghav*, R. Maezono, K. Hongo, S. Sorella, K. Nakano*, "Toward Chemical Accuracy Using the Jastrow Correlated Antisymmetrized Geminal Power Ansatz.", **J. Chem. Theory Comput.** 19, 2222 (2023).

研究発表実績

1) Kenta Hongo (Invited Talk), "Data-driven Materials Research: Exploration and Characterization", 2nd International Symposium on Materials R&D Data, 2023/7/17-18, Wiesbaden, Germany.
2) 本郷研太（招待講演）、「JAIST スパコンを活用した、超越バイオメディカル DX 開発」、川崎市産業振興財団 第 2 回 JAIST シーズ紹介セミナー、2023 年 9 月 29 日、オンライン
3) Kenta Hongo (Invited Talk), "Data-driven Materials Search Combined with Materials Simulations", International Symposium on Materials Informatics 2023, 2023/12/8, JAIST, Nomi, Japan
4) 本郷研太（発表者・招待講演）、宋鵬、奥村健司、市場友宏、前園涼、「複合アニオン化合物の計算材料科学とデータ科学～蛍光体系を中心に～」、極限的励起状態の形成と量子エネルギー変換研究グループ 第 14 回研究会（兼 第 30 回次世代先端光科学研究会）、2024 年 2 月 8 日、静岡大学

研究費獲得実績

1) 令和 5年度科研費・学術変革（A）（ 公募研究）、「超セラミックスのデータ科学的構造探索と DXデータベース構築（研究代表/23H04623）」、R5 年度 1,300 千円（R5 年～R6 年）.
2) 令和 4 年度科研費・基盤研究（B）（ 一般）、「準安定な酸水酸化物結晶の創製と水酸基化学への展開（研究分担/研究代表者：稲田幹/ 22H02170）」、R5 年度 500 千円（R4 年～R6 年）.
3) 令和 3 年度科研費・基盤研究（B）（ 一般）、「水分散系における高分子の移流集積界面分割モデルの設計（研究分担/研究代表者：桶葭 興資/21H01998）」、R5 年度 500 千円（R3 年～R6 年）.
4) 令和 3 年度科研費・基盤研究（C）（ 一般）、「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（研究分担/研究代表者：前園 涼/ 21K03400）」、R5 年度 300 千円（R3 年～R5 年）.

Diffusion Monte Carlo Study of High-Pressure Solid Hydrogen Phase

Putu Bhargo Abhimana Chrysnanda
Hongo Group
Machine:: Kagayaki

Hydrogen is the most abundant element in the universe which often resides under high pressure inside many celestial objects. The study of its phase under such pressure is important for our understanding in many branches of physics such as the physics of stars and planets. However, experimentally studying such a high-pressure regime faces many challenges due to the limitations of experimental apparatuses and consequently, computational methods have become vital in investigating such systems.

From the previous research, hydrogen is expected to transition into a metallic hydrogen (Cs-IV) phase at around 500 GPa. This phase is predicted to be the most stable up until around 2 TPa, at which some other phases such as R-3m structure are predicted to be more favorable than Cs-IV by Density Functional Theory (DFT) studies. In this study, we aim to construct an accurate phase diagram of hydrogen within the pressure range of 500 GPa to 2000 GPa. To construct the phase diagram, the stability of many candidate structures needs to be evaluated in terms of their dynamic enthalpies. These candidate structures are gathered from previous studies and additionally, from employing a crystal structure search based on the evolutionary algorithm implemented in USPEX code. All considered candidate structures are optimized using the DFT method, and the resulting structures are then evaluated using diffusion quantum Monte Carlo (DMC) method to obtain a more accurate static enthalpy. Finally, the dynamic enthalpy is obtained by including the zero-point energy of the structures, which will be evaluated using the harmonic approximation implemented in the Phonopy package.

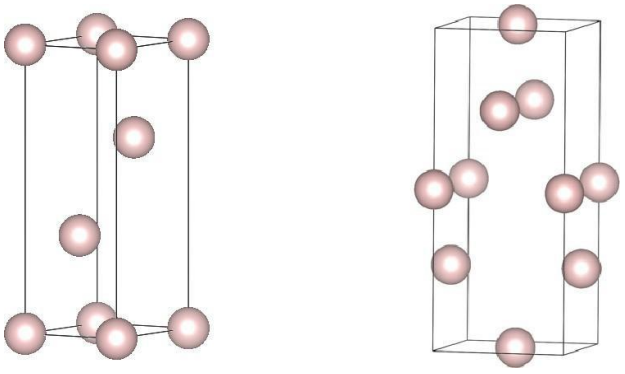


Figure 1: Example of the candidate structure of high-pressure hydrogen: the R-3m structure (left) and Cs-IV structure (right)

第一原理計算による固体電解質の合成経路評価

先端科学技術研究科 本郷研究室 酒井拓
使用計算機: KAGAYAKI

【概要】

全固体電池は液漏れの懸念がなく燃焼性が低いことから、次世代の二次電池として注目されている[1]。特に、フッ化物イオンをキャリアとする全固体 F イオン電池は、高い理論エネルギー密度、F が比較的豊富に存在する元素であることから、有望な候補として挙げられている。また、F イオンの化学的安定性から F_2ガスの発生リスクが低く、金属フッ化物の多くは生体への毒性が比較的低いとされ、安全性の面からも利点がある[2, 3]。

F イオン電池の実用化に向けた主な課題の一つは、高い F イオン伝導性を有する固体電解質の開発である。この点において、β-$KSbF_4$は空気中での安定性や広い電位窓、高い F イオン伝導度を有し、有望な材料として近年注目されている[2-4]。β-$KSbF_4$は、一般的に α-$KSbF_4$を液相反応により合成し、その後の加熱によって相転移させることで得られている。これまで報告されている手法の多くでは、有害なフッ化水素を反応に用いており、より安全な合成手法の検討が求められている[4-5]。

この代替手段として、固相合成法が挙げられるが、当該手法では反応が複数の中間体を段階的に経由して進行するため、最適な合成条件を見出すことが難しい[6]。こうした合成経路の評価手段として、凸包解析が有用である[7]。

凸包解析は、ある化学系における化合物の安定性を第一原理計算によって判定する手法である。これを通じて、β-$KSbF_4$に対する環境親和性の高い合成手法を提案できるほか、固相合成一般における反応経路の理解と合成戦略の構築に寄与することが期待される。

【参考文献】

[1] A. Banerjee et al., CHEMICAL REVIEWS (2020).
[2] J. Liu et al., Sustainable Materials and Technology (2024).
[3] J. Liu et al., Journal of Energy Chemistry (2024).
[4] K. Kawahara et al., J. Power Sources (2021).
[5] C. B. Job et al., Optik (2016).
[6] A. Miura et al., ADVANCED MATERIALS (2021).
[7] C. J. Bartel, Journal of Materials Science (2022).

【関連学会発表】

1) 酒井拓, 市場友宏, 本郷研太, 前園涼, ”第一原理計算による β-$KSbF_4$ の固相合成における反応経路探索", 公益社団法人日本セラミックス協会 2025 年年会
2) Taku Sakai, Tom ichibha, Kenta Hongo, Ryo Maezono, "Prediction of Intermediate Products in the Solid-State Synthesis of Cubic β-$KSbF_4$ Using Density Functional Theory", The 38th International Japan-Korea Seminar on Ceramics.

DFT Study on Li Vacancies Stability in $LiCoO_2$ based on Cluster Expansion Model

26 March 2025
Shool of Information Science, HONGO Laboratory,
SUMBOWO, Joel Fredericko (2410410)
Machine: Kagayaki System

Abstract

Lithium cobalt oxide ($LiCoO_2$) is a widely used cathode material in lithium-ion batteries. This study investigates its thermodynamic stability as lithium is extracted from electrode, focusing on the formation and energetics of lithium vacancy configurations. To achive that, our goal is to identify the most stable Li-vacancy arrangements at different concentrations and evaluate the energies of competing structural phases. We employed density functional theory (DFT) calculations to evaluate the total energies of 100 $LiCoO_2$ supercell structures with randomly distributed lithium vacancies. All calculations were conducted using the *Kagayaki* high-performance computing (HPC) system.

The resulting dataset was used to train a cluster expansion (CE) model via the ICET library, enabling us to explore huge configuration of $LiCoO_2$ with lithium vacancy. We found that magnetic state of Cobalt atoms play a crucial role as it can be Co^{3+} or Co^{4+} depend on the lithium concentration in our system. Thus, we explored various initial magnetic states and self-consistent field (SCF) algorithms to avoid convergence to local minima. Our findings emphasize the importance of correct spin initialization, double relaxation, and choice of SCF algorithm ("algo = all") for reliable energy predictions as shown in fig 1. The final CE model effectively captures the vacancy energetics, providing insights into phase stability and guiding future studies in Li-deficient $LiCoO_2$ systems.

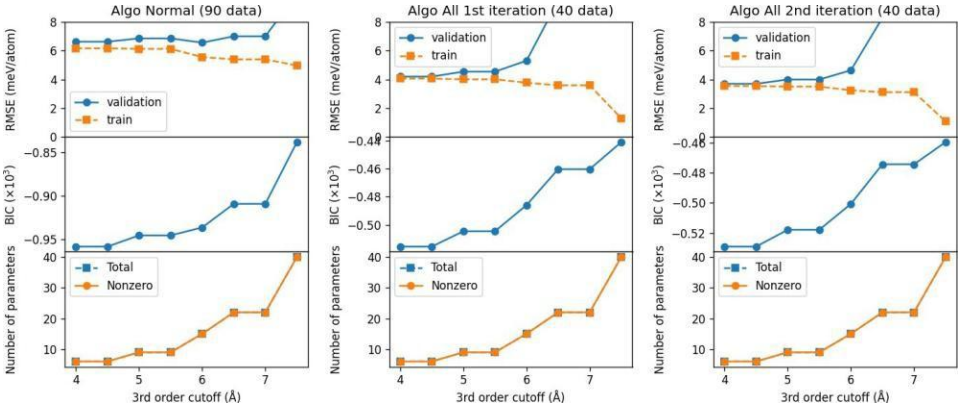


fig 1 Root Mean Square Error and Bayesian Interference of Cluster Expansion using Algo Normal (Blocked-Dacidson-iteration scheme) and Algo All (Gradient Conjugate) for electronic minimization algorithm

Reference

[1].Marianetti, C. A., Kotliar, G., & Ceder, G. (2004). A first-order Mott transition in lixcoo2. Nature Materials, 3(9), 627–631. https://doi.org/10.1038/nmat1178

[2]. Aykol, M., Kim, S., & Wolverton, C. (2015). Van der waals interactions in layered lithium cobalt oxides. The Journal of Physical Chemistry C, 119(33), 19053–19058. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06240

ハイエントロピー合金の$L1_2$, $D0_{23}$および$D0_{22}$

規則-不規則共存構造の価電子濃度依存性

韓国科学技術研究院 水関博志
情報社会基盤研究センター 本郷研太
使用計算機: KAGAYAKI

概要

一部の構成元素が $L1_2$, $D0_{22}$ 構造である規則-不規則共存構造を有するハイエントロピー合金が報告されている。しかし、$D0_{23}$ に代表される、より長い周期構造の存在は確認されていない。本研究では、第一原理計算を適用して Al, Fe, Co, Ni, Cu, Zn から 4 元素を選んだ 15 種類の equiatomic quaternary alloy、および、semi-ordered phase を形成する元素(Cr)を除いた残り 75 at. %の構成元素(Fe, Co, Ni)の組成比率を変化させた CrFeCoNi non-equiatomic alloy の形成エネルギーを算定し、規則-不規則共存構造の存在条件を算定した。equiatomic quaternary alloy と CrFeCoNi non-equiatomic alloy ともに規則-不規則共存構造の安定性には Valence Electron Concentration (VEC)依存性が見られた。この計算結果は FCC ハイエントロピー合金に存在する規則性に関する知見を与える。

これまでの共同研究をさらに展開、拡張させるために令和 8 年度 JSPS 二国間交流事業（共同研究）に応募予定である。

参考文献

1. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo, “Order-Disorder Competitive Cooperation in Equiatomic 3*d*-Transition-Metal Quaternary Alloys: Phase Stability and Electronic Structure”, Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods, **3** (2023) 2153632.
2. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hong, “Valence Electron Concentration Dependent Stability of $L1_2$, $D0_{23}$, and $D0_{22}$ Ordered Phases in High-Entropy Alloys”, in preparation.

学会発表

1. Hiroshi Mizuseki, “Atomistic Configurations in Alloying Materials: High-entropy Alloys & Mixed Group-III Nitrides”, JAIST-KIST joint seminar (Mopko, Korea, July 19, 2024.)
2. Hiroshi Mizuseki, “Atomistic Configurations in Mixed Crystals: Mixed Group-III Nitrides & High-entropy Alloys”, Seminar in Institute of Physics (IOP), Chinese Academy of Sciences (CAS), (September 4, 2024.)
3. Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, and Kenta Hongo (Invited), “Valence Electron Concentration Dependency in Semi-Ordered High-Entropy Alloys: $L1_2$, $D0_{23}$, and $D0_{22}$ Phases”, The 11th International Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-11) (Yokohama, Japan, June 1-3, 2025. 予定)

Superconductivity in o-MAX phases

Mohammad Khazaei (University of Tehran)
Kenta Hongo (RCACI, JAIST)
Machine: KAGAYAKI

In recent years, MAX phases and their two-dimensional counterparts, MXenes, have emerged as significant subjects of interest in the fields of science and engineering, owing to their varied geometries, compositions, and extensive range of applications. This research employs first-principles calculations to explore the geometrical structures, electronic characteristics, phonon dispersions, dynamic stability, electron–phonon coupling (EPC), and superconducting properties of 27 out-of-plane ordered double transition metal carbides, referred to as o-MAX phases, characterized by the general formula $M_2M'AlC_2$ (where M = Nb, Mo, W and M' = Sc, Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Mo, W). We have identified 16 superconducting o-MAX phases, with four specific compounds W_2VAlC_2, W_2NbAlC_2, W_2TaAlC_2, and Mo_2NbAlC_2 exhibiting a critical temperature (T_c) that surpasses 10 K, representing the highest Tc reported experimentally for MAX phases thus far. The calculated EPC constants for these materials are 0.98, 0.99, 1.02, and 0.74, correlating with T_c values of 17.9, 14.8, 14.5, and 11 K, respectively. Remarkably, the predicted transition temperature of 17.9 K stands as the highest T_c theoretically anticipated for any MAX phase to date. We conduct a thorough analysis of the specific mechanisms that facilitate superconductivity in these o-MAX systems. Our findings suggest that the presence of Kohn anomalies in low-frequency modes enhances electron–phonon interactions, resulting in increased superconducting transition temperatures (T_c). Additionally, our results indicate that $Nb_2M'AlC_2$ compounds do not display superconducting behavior.

To advance this collaborative research, we intend to broaden our investigation to include the superconducting properties of 2D MXenes, aiming to gain a deeper insight into the superconductivity characteristics within this material family.

Collaborative papers:

1. Mohammad Keivanloo, Mohammad Sandoghchi, MohammadReza Mohammadizadeh, Mitsuaki Kawamura, Hannes Raebiger, Kenta Hongo, Ryo Maezono, and Mohammad Khazaei, "Superconductivity in o-MAX phases", Nanoscale. 2025;17(9):5341-9.

2. Kaenat Hamidi, Mohammad Keivanloo, Mohammad Sandoghchi, MohammadReza Mohammadizadeh, Hannes Raebiger, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Kaoru Ohno, and Mohammad Khazaei, "Superconductivity in Haeckelite compounds", In submission, iScience (2025).

Prediction of Phase Formation of Quantum Materials

Using Experimental Data and Machine Learning

Yoichi Higashi (AIST)
Sonosuke Kono (Tokyo University of Science)
Ryo Maezono, Kenta Hongo (JAIST)
Machine: KAGAYAKI

We focus on layered perovskite compounds as a typical example of multinary systems to identify indicators for phase formation (phase formation determinants) that would be available for predicting phase formation. We developed a machine learning model to predict phase formation using hundreds of experimental data on phase formation. To predict the formation of new materials in layered perovskite compounds, we developed the Python codes [Ref. 1] to compute the phase formation determinants for this system using SISSO (Sure Independence Screening and Sparsifying Operator), a type of symbolic regression that is expected to have high extrapolation performance. The experimental data on phase formability in an arsenic system were classified, achieving a classification accuracy of ~ 85%. We also constructed a prediction model by using ~ 300 experimental data on phase formability including nonarsenic systems and evaluated the generalization performance of the phase formation determinants. With this model, we predicted the phase formation in layered perovskite arsenic fluorides [Ref. 2]. This work was supported by JSPS KAKENHI (Grant No. JP24K07571).

References:

1. https://github.com/souno1218/nb_sisso
2. “Prediction of Phase Formation in Layered Perovskite Arsenic Fluorides”, Sonosuke Kono, Yoichi Higashi, Yuki Iwasa, Izumi HASE, Ryo Maezono, Taichiro Nishio, Hiraku Ogino, Kenta Hongo, Journal of Physics: Conference Series, accepted for publication.

Conference Presentations:

1. “Prediction of the phase formation of layered perovskite compounds”, Sonosuke Kono, Yoichi Higashi, Yuki Iwasa, Izumi Hase, Ryo Maezono, Taichiro Nishio, Hiraku Ogino, Kenta Hongo, The 37th International Symposium on Superconductivity (ISS2024), 4 December 2024, Kanazawa (Japan).
2. 「層状ペロブスカイト砒素フッ化物の相生成予測」, 河野 颯之介, 東 陽一, 岩佐 祐希, 長谷 泉, 前園 涼, 西尾 太一郎, 荻野 拓, 本郷 研太, 2025年第72回応用物理学会春季学術講演会, 2025年3月25日, 東京理科大学野田キャンパス

ニューラルネットワークポテンシャルを用いた酸化物固溶体の固液相境界の研究

所属・氏名: 情報科学系・市場友宏
使用計算機: Kagayaki

概要

本研究では、酸化物固溶体の融点、すなわち固体と液体の自由エネルギーが一致する温度を予測するために、従来の第一原理分子動力学に匹敵する精度を持ちながら計算コストを大幅に削減できるニューラルネットワークポテンシャル（NNP）を導入した手法を提案した。まず、金属の Cu　や高融点金属の W、化合物の MgO　といった基準となる単純な系に対して、温度依存性の自由エネルギー計算を通して融点を求め、その結果が実験値や他のシミュレーション手法と良好に一致することを示すことで NNP　モデルの有効性を確認した。次に、BaO-CaO　固溶体系にこの手法を適用し、固体と液体それぞれの自由エネルギーを詳細に解析することで、先行研究で示された CALPHAD　法との比較検証を行い、固溶体中での融点のシフトやエンタルピーの変化、さらに構造的な特徴から、従来の経験的ポテンシャルが示す偏りとそれに起因する予測誤差に対して、NNP　モデルがより現実に即した再現性を示す点を明らかにした。結果として、本研究では、NNP　を用いた分子動力学シミュレーションが高融点酸化物固溶体の固体-液体相境界の予測において、低コストかつ高精度な有用な手法となることを実証することができた。

関連発表論文

1）H. Hyodo et al., J. Alloys Compd. 1006, 176227 (2024).

デラフォサイトがホストするハニカム相とカゴメ相の予測

所属・氏名: 情報科学系・市場友宏
使用計算機: Kagayaki

概要

この論文では、層状のデラフォサイト酸化物（一般式 ABO_2）の構造に、特定の元素をドーピングすることで、ハニカムやカゴメといった新しい規則的な二次元格子構造が形成できるかどうかを第一原理計算から調べた。既知の 55 種類のデラフォサイトをもとに、A サイトまたは B サイトに候補となる元素を導入して理論計算を行い、各化合物の安定性（形成エネルギー）を評価した。その結果、A サイトにおいては新たな規則的な構造が形成される候補はごくわずかである一方、B サイトでは多くのハニカムやカゴメ構造が安定して形成される可能性が示された。さらに、予測された中のいくつかはすでに実験的に合成されていることが確認されており、今後、量子コンピューティングやスピントロニクス、高温超伝導などの応用につながる可能性が期待される。

関連発表論文

1）J.T. Krogel et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 26, 8327 (2024).

無秩序なイオン配置パターンに伴う複数の Ce^{3+}の発光スペクトル

所属・氏名: 情報科学系・市場友宏
使用計算機: Kagayaki

概要

本研究では、Ce ドープした $Ca_{5.7}Y_{1.3}Si_7O_{16.7}N_{3.3}$ が、紫外線照射に対して、Ce のドープ量に応じて紫色から白色の蛍光を発することを明らかにした。我々の知る限り、Ce のみを発光中心とする白色蛍光体はこれまでに報告されていない。また、ドープされた Ce は結晶学的に 1 種類の Ca/Y 混晶サイトをほぼ選択的に占有することを第一原理計算より明らかにした。さらに、結晶学的に同一の混晶サイトであっても、アニオンやカチオンの不規則配列によって、局所的に非等価なサイトが生じており、これらを占有する Ce イオンがそれぞれ異なる蛍光スペクトルを与える発光中心となり、当該系が擬似白色の蛍光を発していることを明らかにした。

関連発表論文

1) T. Yasunaga et al., Inorg. Chem. 63, 1288 (2024).

Understanding Interface Behavior in SnS/ZnS Heterostructures: Stability and Electronic Properties

Rohit Dahule (JAIST)
Maezono Group, JAIST
Machine: KAGAYAKI

This research focuses on understanding the stability and electronic properties of interfaces formed between tin sulfide (SnS) and zinc sulfide (ZnS), aiming to develop more efficient and stable semiconductor heterostructures. Bulk and surface calculations are briefly performed to provide necessary information for constructing reliable interface models. The main objective is to optimize the atomic and electronic structures at the SnS/ZnS interface to support applications in optoelectronics, particularly in solar cell technologies. The pristine interface is modeled by combining the low-energy SnS (100) surface with the ZnS (110) surface. First-principles calculations based on density functional theory reveal that this interface adopts a staggered type-II band alignment. This interface is highly advantageous, as it facilitates efficient charge carrier separation. Such an electronic structure is particularly desirable for photovoltaic applications. To investigate the effects of realistic imperfections, several defect configurations are generated at the SnS/ZnS interface. A total of six models are created to simulate common defect scenarios that might occur. Analysis shows that when the atomic distributions from SnS and ZnS are well-balanced at the interface, the heterostructure maintains its semiconducting behavior with an appropriate bandgap. This suggests that certain defect types do not necessarily degrade device performance if they are properly managed. On the other hand, defect configurations dominated by atoms from only one of the two materials lead to metallic characteristics, introducing states within the bandgap and promoting undesirable charge carrier recombination. These metallic states are detrimental for photovoltaic devices, as they can significantly reduce open-circuit voltage and device efficiency. In conclusion, precise control over interface structure and defect distribution is essential for optimizing SnS/ZnS heterostructures for solar energy applications.

References:

1. Rohit Dahule, Bo Gao, Kenta Hongo, Emila Panda, Yanming Ma, and Ryo Maezono, Stability and Electronic Properties of SnS/ZnS Interfaces: A First-Principles Investigation, J. Phys. Chem. C, 2025 *129* (6), 3158-3167

Conference Presentations:

1. Rohit Dahule, Kenta Hongo, and Ryo Maezono, “Stability and electronic properties of SnS/ZnS interfaces for thin-film solar cells: a first-principles study”, The Physical Society of Japan (JPS) Annual Meeting 2024, Sapporo, Japan

Data-Driven Discovery of Polymer Crystals with High Thermal Conductivity through Physics-Informed Screening

Rohit Dahule (JAIST)
Ryo Maezono (JAIST)
Kenta Hongo (JAIST)
Maezono Group, JAIST
Machine: KAGAYAKI

Overview:

High thermal conductivity (HTC) in polymers is a key property that greatly improves their functionality in industrial fields such as modern electronics and electrical systems. Given the complexity and numerous variables in polymer synthesis, relying solely on experimental methods to discover HTC polymers is impractical, highlighting the need for predictive modeling. In this work, we targeted polymer crystals, considered to set the upper limit for thermal conductivity in polymers, and employed a data-driven approach combining physics-informed screening with first-principles phonon calculations to identify promising candidates. A computationally efficient physical quantity linked to thermal conductivity was chosen to facilitate the high-throughput screening of 1073 polymer crystal structures sourced from the Polymer Genome database. This strategy led to the discovery of polymethylenimine (PMI), poly(methylene oxide) (PMO), and polyamide (PA) crystals, exhibiting lattice thermal conductivities (LTCs) of 21.81, 94.95, and 65.27 W/(m·K) at 300 K, respectively. Notably, PMO demonstrated an LTC surpassing 100 W/(m·K) across the 100–270 K temperature range. To deepen the understanding of predicted polymer crystals with high thermal conductivity, additional analyses were conducted on phonon lifetimes, group velocities, mean free paths, and modal heat capacities of these polymer crystals.

References:

1. Rohit Dahule, Kenji Oqmhula, Ryo Maezono, and Kenta Hongo, Physics-Informed Data-Driven Discovery of Polymer Crystals with High Thermal Conductivity, ACS Appl. Polym. Mater. 2025 *7* (3), 1431-1439

Conference Presentations:

1. Rohit Dahule, Kenji Oqmhula, Ryo Maezono, and Kenta Hongo, “High-throughput virtual screening for high thermal conductivity polymer crystals using first- principles calculation”, APS March Meet 2024, Minneapolis, Minnesota, USA
2. Rohit Dahule, Kenji Oqmhula, Ryo Maezono, and Kenta Hongo, “Physics-informed data-driven discovery of high thermal conductive polymer crystals”, The 71st JSAP Spring Meeting 2024, Tokyo, Japan

DFT and QMC analysis on Mn-based metal-organic framework for CH_4 partial oxidation reaction

School of Information Science, Maezono Laboratory,

SUKANLI, Reza Pamungkas Putra

Machine: Kagayaki System

By utilizing computational resources from JAIST's educational facility, we conducted a series of Density Functional Theory (DFT) and Quantum Monte Carlo (QMC) calculations on Mn-based metal-organic framework (MOF) systems. The quantum chemistry package Gaussian 16[1] was used to optimize the structures of the MOF systems. Furthermore, QMC calculations were performed using PySCF[2] and QMCPACK[3] to determine the ground-state energy of the optimized system. Gaussian 16 and PySCF calculations were executed on a single node with a maximum of 128 cores and 500 GB of RAM, requiring approximately one to five hours to complete. In contrast, QMCPACK calculations were performed on approximately four nodes and took around one to three days to complete. These computational methods were employed to study the methane partial oxidation reaction, which is crucial for evaluating the catalytic performance of the system. Selecting an appropriate exchange-correlation (XC) functional for DFT calculations is essential to ensure accurate modeling of the reaction process. By using Diffusion Monte Carlo (DMC) energy as a reference, we can assess the accuracy of different XC functionals and determine the most suitable one for this study.

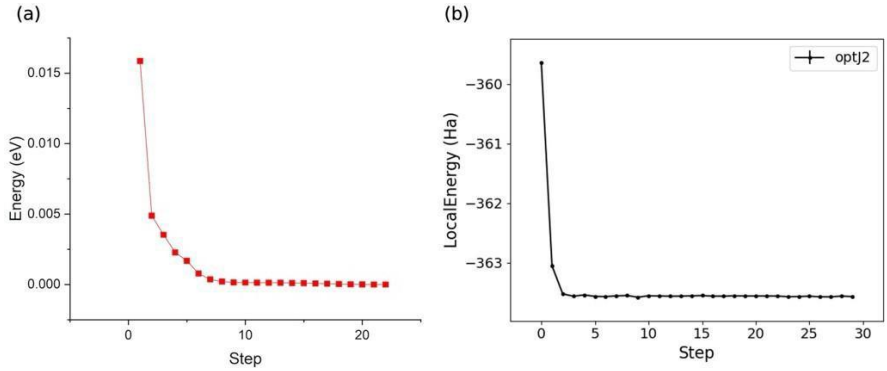


Figure 1. (a) Convergence of total energy (in eV) during structure optimization using DFT. (b) Wavefunction optimization using QMC.

References

[1] M. J. Frisch et al. Gaussian~16 Revision C.01. Gaussian Inc. Wallingford CT. 2016.

[2] Qiming Sun et al., WIREs Comput. Mol. Sci., 8, e1340 (2018).

[3] Jeongnim Kim et al., J. Phys.: Condens. Matter., 30, 195901 (2018).

第一原理拡散モンテカルロ法による $NiPd(CN)_4$ の磁気・構造相転移解析

情報科学系 前園研究室

藤丸 竜之介

使用計算機 ：Kagayaki System

JAIST の HPC システムである Kagayaki を使用して、Density Functional Theory (DFT)および Quantum Monte Carlo (QMC)法による第一原理計算を四配位金属シアニド $NiPd(CN)_4$[1]に対して行った。金属シアニド $NiPd(CN)_4$ は、昇温に伴って配位形態の変化とともに低スピン状態から高スピン状態への遷移を示すことが実験により示唆されている。その具体的プロセスとして、平面型(Planar 型/S=0)から歪んだ四面体型(Tilt 型/S=1)に徐々に転移することが仮説として提案されている(Fig 1)。しかし、結晶構造もまだ完全には明らかになっておらず、このような転移が実際に起こっているのかは未解明である。そこで当該系に対し提案されている二つの構造モデルに対し、第一原理計算計算の中で最も信頼性の高いとされる QMC 法を用いてエネルギー的安定性の観点から上述の仮説検証を行った。

系の構造最適化には VASP[2]を使用し、QMC 計算で使用する試行節の作成には Quantum espresso[3]を使用し、一連の QMC 計算は Nexus workflow automation system[4]を用いて QMCPACK[5]で実行した。最大で原子数 140、電子数 1008 のスーパーセルに対する計算を、ノードあたり 128 コア／500GB メモリを使用して、計 16 ノードで実行した。

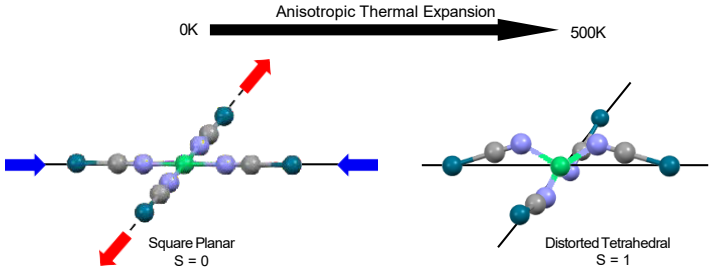


Fig 1. 温度変化に伴う四配位 Ni(II)中心の配位形態の変化

参考文献

[1] Y. Iwai *et al.*, 日本化学会第 103 春季年会(2023), K504-2am-09.

[2] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B 47 , 558 (1993); G. Kresse *et al.*, Comput. Mat. Sci. 6 , 15 (1996); G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B 54 , 11 169 (1996).

[3] P. Giannozzi *et al.*, J. Phys. Condens. Matter 21, 395502 (2009); P. Giannozzi *et al.*, J.Phys.:Condens.Matter 29, 465901 (2017); P. Giannozzi *et al.*, J. Chem. Phys. 152, 154105 (2020).

[4] J. T. Krogel, Comput. Phys. Commun. 198 154 (2016).

[5] J. Kim *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter 30 195901 (2018); P. Kent *et al.*, J. Chem Phys. 152 174105 (2020).

関連口頭発表

1）藤丸竜之介（他 5 名），"四配位金属シアニド $NiPd(CN)_4$における Ni(II)の配位形態変化に関する理論的研究"，日本セラミックス協会 2025 年年会，静岡大学浜松キャンパス，03/07/2025.

Computational Design of Novel Superconducting Hydrides and Functional Materials

PENG SONG (Tohoku Univ.)

Kenta Hongo, Ryo Maezono (JAIST)

Machine: KAGAYAKI

The design and discovery of advanced functional materials are foundational to the development of key technologies in clean energy, quantum information science, and next-generation electronics. To transcend the limitations of traditional trial-and-error approaches, computational materials science is essential for accelerate the identification of promising candidates. In 2024, my research primarily focused on high-pressure superconducting hydrides, particularly within the La–Th–H ternary system.[1,2] By integrating evolutionary algorithms with first-principles calculations, I systematically mapped the pressure-dependent phase diagram. Several hydrogen-rich compounds were found to be thermodynamically stable at 200 GPa. Among these, the La_3ThH_{40} phase displayed strong electron–phonon coupling (EPC), leading to a predicted superconducting critical temperature of 242 K—highlighting its potential as a high-T_c superconductor. In collaboration with Prof. Masubuchi, structural phase transitions in $Ba_{0.9}M_{0.1}NCN$ (M = Ca, Sr) carbodiimides were investigated[3]. Variable-cell nudged elastic band (VCNEB) calculations revealed that the transition mechanism involves shear-induced displacement of Ba^{2+} ions and reorientation of NCN^{2-} molecular anions. Notably, this transformation can occur at low pressures and is even mechanically activated via manual grinding, suggesting the existence of unconventional phase transition pathways in molecular-anion-based systems. Additionally, we proposed a novel gas-sensing mechanism based on Schottky junction formation[4]. For monoclinic VO_2(M1), following synthesis optimization guided by machine learning, an atypical increase in resistance upon NH_3 exposure—contrary to conventional gas sensing behavior. This anomaly was rationalized using a newly introduced selectivity coefficient derived from the correlation between work function and electron affinity, offering a predictive framework for gas selectivity. Going forward, my research will target the microscopic origins of hydride superconductivity, focusing on the interplay between EPC and structure. This requires large-scale phonon calculations, for which continued collaboration with Prof. Hongo and access to JAIST's computational resources will be essential. By combining high-throughput simulations with machine learning, I aim to accelerate data-driven superconductor design.

References:

1. P. Song, A. P. Durajski, Z. Hou, A. Ghaffar, R. Dahule, R. Szczcesniak, K. Hongo, R. Maezono, J. Phys. Chem. C. 128, 2656-2665 (2024).
2. 宋 鵬, 本郷 研太, 前園 涼, 日本結晶成長学会誌,51,4 (2025).
3. Y. Yamamoto, K. Kume, S. Miyazaki, A. Shinozaki, P. Song, S. Hasan, K. Hongo, R. Maezono, H. Ubukata, H. Kageyama, M. Higuchi, Y. Masubuchi, J. Am. Chem. Soc. 147, 11390-11398 (2025).
4. L. Miao, P. Song, Y. Xue, Z. Hou, T. Hasegawa, A. Okawa, T. Goto, Y. Seo, R. Maezono, T. Sekino, S. Yin, Adv. Mater. 2413023 (2024).

Thermodynamic assessment of Ta-N-(Hf/O) systems using the CALPHAD approach

Niraja Moharana (IIT Madras)

Ryo Maezono (JAIST)

Machine:: kagayaki

Transition metal nitrides, particularly tantalum nitrides, are crucial for applications in extreme environments due to their superior mechanical and thermodynamic properties. Θ-TaN, a high-pressure polymorph with a high bulk modulus (362 GPa) and hardness (31.7 GPa), has emerged as a technologically promising phase. Interestingly, we observed the formation of θ-TaN at ambient pressure during the thermal decomposition of oxygen-containing Ta_3N, suggesting the role of oxygen in stabilizing the high-pressure phase. This was confirmed through XRD, Raman spectroscopy, STEM-HAADF, EELS, and XEDS, which indicated ~7 at.% oxygen in θ-TaN. First-principles DFT calculations were employed to evaluate the thermodynamic stability of oxygen-substituted and pure θ-TaN via formation enthalpies, elastic constants, and phonon dispersions. The results show that oxygen induces the stability of θ-TaN at atmospheric pressure. We performed DFT-based calculations of formation enthalpies for stable and select metastable Ta-N and Ta-N-O compounds, which served as inputs for Gibbs energy modelling using the CALPHAD approach. Ta_3N_5 was confirmed as an equilibrium phase and included in the thermodynamic descriptions. Where possible, phonon calculations and DSC experiments were used to estimate heat capacities. The combined dataset allowed the development of consistent and reliable Gibbs energy functions for key phases in the Ta-N and Ta-N-O systems.

Published papers:

1) Niraja Moharana, Ravi Kumar, Ryo Maezono, K. C. Hari Kumar, “Thermodynamic modelling of Ta-N-O system”, (2025) (Accepted – Journal of the American Ceramic Society) DOI: https://doi.org/10.1111/jace.20521

2) Niraja Moharana, Chanchal Ghosh, Arup Dasgupta, Ryo Maezono, Ravi Kumar, K. C. Hari Kumar, “Thermal decomposition of oxygen-containing Ta_3N_5”, Journal of the American Ceramic Society, 107(9), 6342-6352 (2024) DOI: https://doi.org/10.1111/jace.19869

Mechanistic Investigation of CH_4 to CH_3OH Conversion on Graphene-based Metal-Dimmer Catalyst

Muhammad Haris Mahyuddin (ITB)
Kenta Hongo, Ryo Maeozno (JAIST)
Machine: KAGAYAKI

Recent advances in materials science and catalysis have identified the potential of graphene-based catalysts as a viable approach to address the challenges of directly converting methane (CH_4) to methanol (CH_3OH) for sustainable and cleaner energy solutions. The unique physicochemical properties of graphene, including high surface area and the potential for atomic-scale catalytic site design, make it a promising support for catalyst development. The introduction of heteroatoms such as metal–N_x complexes can also modulate their catalytic properties, offering a potential pathway to enhance catalytic performance. Our team has extensively studied these single-atom catalyst (SAC) complexes using DFT (VASP), focusing on MN_4G and those doped with boron or phosphorus, to explain the catalytic mechanism underlying CH_4 to CH_3OH conversion [1-2]. From this study, we discerned that the phosphorus-doped CuN_4G (CuN_4G–PN) emerges superior, as it can spontaneously dissociate O_2, with respect to phosphorus's tendency to form P–O Bonds, and Cu's capacity to activate CH_4 into CH_3-radicals with low activation energy [3].

I hope that with the use of the JAIST Supercomputer, we can accelerate the computations and increase the number of joint publications that are important for our mutual benefit.

References:

1. Afifah, H.; Mahyuddin, M. H.; Saputro, A. G.; Shukri, G.; Agusta, M. K.; Maezono, R.; Dipojono, H. K. O_2-Assisted Methane Oxidation to Methanol over Single Atom-Decorated Anatase TiO_2: Mechanistic Insights from First Principles. New J. Chem. 2025, 49 (6), 2382–2392.
2. Sukanli, R. P. P.; Mahyuddin, M. H.; Saputro, A. G.; Agusta, M. K.; Yudistira, H. T.; Yoshizawa, K.; Dipojono, H. K. Density Functional Theory Studies of the Direct Conversion of Methane to Methanol Using O_2 on Graphitic MN_4G-BN (M = Fe, Co, Cu) and CuN_4G-PN Single-Atom Catalysts. ACS Appl. Nano Mater. 2023, 6 (8), 6559–6566.
3. Sukanli, R. P. P.; Mahyuddin, M. H.; Saputro, A. G.; Maezono, R.; Hongo, K., Mechanistic Investigation of CH_4 to CH_3OH Conversion on Graphene-based Metal-Dimmer Catalyst. In preparation.

ガスセンサ応用に資する無機蛍光体の蛍光変調能の研究

東北大学 半谷泰生
情報社会基盤研究センター 本郷研太
先端科学技術研究科 前園涼
使用計算機: KAGAYAKI

近年、蛍光体の励起光源として用いられる LED は、小型化および低価格化が進んでおり、それに伴って蛍光体の多様な応用が提案されている。なかでも、蛍光変調を利用して対象ガスをリアルタイムに検出する蛍光式ガス検知器は、簡便かつ視覚的に直感的な検知が可能である点において注目を集めている。

しかしながら、蛍光式ガス検知に関する研究は依然として萌芽的段階にあり、適切な材料系や検知メカニズムに関する知見は十分に蓄積されていないのが現状である。

本研究では、希土類イオン賦活型無機蛍光体とガス分子との化学的相互作用によって引き起こされる蛍光変調の起源を明らかにすることを目的とし、実験的検証に加えて、第一原理計算に基づく電子状態の変化解析を行う。

参考文献

1. T. Hangai, T. Hasegawa*, J. Xu, T. Nakanishi, T. Takeda, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, T. Goto, Y. Sato, A. Okawa, S. Yin, Key Role of Metal-to-Metal Charge Transfer Transition between Mo^{6+} and Bi^{3+} for Enhancement in NIR Luminescence of Gd_2MoO_6:Bi,Yb Nanophosphor, J. Phys. Chem. C. 128, 3351-3360, (2024).

学会発表

1. Taisei Hangai, Takuya Hasegawa, Jian Xu, Takayuki Nakanishi, Takashi Takeda, Kousuke Nakno, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Ayahisa Okawa, Shu Yin. Revealing the sensitization mechanism of NIR luminescence in Bi^{3+}-doped Gd_2MoO_6:Yb nanophosphor. 第 61 回セラミックス基礎科学討論会.岡山. 2023/1/8.（口頭発表）
2. 半谷泰生、長谷川拓哉、許健、中西貴之、武田隆史、中野晃佑、本郷研太、前園涼、大川采久、殷シュウ. Bi^{3+}添加による近赤外ナノ蛍光体 Gd_2MoO_6:Yb の蛍光増感機構メカニズム. 日本セラミックス協会 2023 年年会. 神奈川. 2023/3/9.（口頭発表）
3. 半谷泰生、長谷川拓哉、許健、中西貴之、武田隆史、中野晃佑、本郷研太、前園涼、大川采久、殷シュウ. 近赤外ナノ蛍光体 Gd_2MoO_6:Bi,Yb における Bi^{3+}添加による Yb^{3+}の発光増感機構調査. 第 39 回希土類討論会. 北海道. 2023/5/30.（口頭発表）

Atomic-Scale Insights into Gas and Liquid Structure and Reactivity at Transition Metal Oxides Interface for Battery and Energy-related Application

Mohammad Kemal Agusta, ITB
Ryo Maezono, JAIST
Machine: Kagayaki

Li-ion batteries are pivotal for (hybrid) electric vehicle applications, with layered lithium transition metal oxides, particularly $LiNi_xMn_yCo_zO_2$ (NMC), offering promising energy density. To reduce cobalt use, there has been a push to increase Ni content from NMC111 to NMC622 and NMC811, which improves initial charge capacity but also accelerates undesirable interfacial reactions such as carbonate and salt decomposition, and gas evolution. These degradation pathways, driven by the electronic structure of Ni-rich oxides, are linked to the thermodynamic tendency of surface oxygen to dehydrogenate solvents like ethylene carbonate (EC) and ethyl methyl carbonate (EMC). This results in surface protic species that further react with $LiPF_6$, forming less fluorinated by-products such as PF_3O and PF_2O^{2-}, as shown by FT-IR, XPS, and NMR studies. These chemical reactions often occur below 4.8 V, Li and vary with oxide composition. Stabilizing the oxide-electrolyte interface has thus become essential, with strategies including electrode coatings, compositional tuning (e.g., Ni-poor surface layers), electrolyte additives, and altering solvation structure via salt type or concentration. Studies have demonstrated, for example, that switching from $LiPF_6$ to $LiBF_4$ or increasing salt concentration can suppress parasitic reactions and enhance cycling stability in Ni-rich NMC and high-voltage spinel cathodes.

In this proposed work, we aim to uncover design principles for stabilizing the Ni-based oxide/electrolyte interface through molecular-level insights. Using first-principles molecular dynamics (FPMD) simulations combined with statistical thermodynamic analysis, we will investigate how solvent and salt interact at the $LiNiO_2$ surface. Previous experiments indicate that increasing $LiPF_6$ concentration enhances NMC811's cycling performance, and we will simulate this effect to understand changes in solvation structure and identify reactive intermediates. IR spectra from simulations will be compared with in-situ FT-IR data to validate our findings. Specifically, we will study EC electrolytes with four salts—$LiBF_4$, $LiClO_4$, LiTFSI, and LiFSI—at the $LiNiO_2$ interface. This work will also set the stage for broader investigations into solvent-salt combinations, ultimately contributing to a data-driven foundation for engineering stable, cobalt-free, Ni-based Li-ion batteries.

Beyond Li-ion systems, this research framework will be extended to study other gas-solid interface reactions in energy materials, such as those found in solid oxide fuel cells, CO_2 electrolysis,

direct-methane-to-methanol conversion and ammonia synthesis catalysts. By applying similar FPMD and surface reactivity analysis techniques, we aim to explore the fundamental mechanisms governing surface stability, molecular adsorption, and catalytic reactivity under operating conditions. These efforts will contribute to the broader understanding of surface-driven degradation and reaction pathways in electrochemical energy systems, enabling cross-cutting strategies for interface engineering across next-generation energy technologies.

Published papers:

1) "O_2-assisted methane oxidation to methanol over single atom-decorated anatase TiO2: mechanistic insights from first principles", Hasna Afifah, Muhammad Haris Mahyuddin, Adhitya Gandaryus Saputro, Ganes Shukri, Mohammad Kemal Agusta, Ryo Maezono, Hermawan Kresno Dipojono, New Journal of Chemistry 49 (2025) 2382-2392
2) "Effect of the oxygen vacancy electronic state on Ni migration in $Li_{0.5}(Ni_{0.8}Mn_{0.1}Co_{0.1})O_2$ cathode material", avanny WM Komalig, Ganes Shukri, Mohammad Kemal Agusta, Muhammad Haris Mahyuddin, Afriyanti Sumboja, Adhitya Gandaryus Saputro, Ryo Maezono, Ahmad Nuruddin, Hermawan Kresno Dipojono, Physical Chemistry Chemical Physics 25 (2023) 31374-31381

窒化チタン薄膜の電子輸送特性

NTT物性科学基礎研究所 瀧口耕介、Y. Krockenberger、谷保芳孝、山本秀樹
サスティナブルイノベーション研究領域 市場友宏、本郷研太、前園涼
使用計算機: KAGAYAKI

本研究では、分子線エピタキシー（MBE）法を用いて成長させた窒化チタン（TiN）薄膜の電子輸送特性について検討した。得られた薄膜は、残留抵抗比（residual resistivity ratio, RRR）15.8 という高い値を示し、成長温度と結晶品質の間には明確な相関関係が認められた。この関係性は、RRR 値および格子定数の変化として現れている。超伝導特性の評価により、ギンツブルグ＝ラウダウ理論に基づくコヒーレンス長は 60.4 ± 0.6 nm と求められ、これはスパッタ法で作製された従来の TiN 薄膜に比して有意に長く、超伝導コヒーレンスの向上を示唆する結果となった。さらに、第一原理計算を実験データと組み合わせることで、TiN 薄膜における電子構造および輸送特性に関する詳細な理解が得られた。加えて、温度依存のホール係数測定により、異方的な電子散乱機構の寄与が明らかとなった。以上の成果は、窒化物超伝導体の材料開発に新たな知見を提供し、量子コンピューティング技術への応用展開に向けた基盤を与えるものである。

研究業績

5. Kosuke Takiguchi*, Yoshiharu Krockenberger, Tom Ichibha, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yoshitaka Taniyasu, and Hideki Yamamoto, "Electronic transport properties of titanium nitride grown by molecular beam epitaxy", arXiv:2504.11065v1 (投稿中).

研究発表実績

1. Ab initio calculation of structure stability in Pr-Ta-N system, Kosuke Takiguchi, Tom Ichibha, Yoshiharu Krockenberger, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yoshitaka Taniyasu, and Hideki Yamamoto, APS Joint March Meeting and April Meeting Global Physics Summit 2025 Poster Session III: CONDENSED MATTER PHYSICS (DCMP) Poster 48

Research title: Theoretical Study of Sodium Atom Diffusion in Ti_3C_2 Using Density Functional Theory for Sodium-Ion Battery Applications

Mohaddeseh Abbasnejad, University of Kerman
Tom Ichibha, Ryo Maezono, JAIST
Machine: Kagayaki

This proposal outlines a theoretical investigation into the diffusion of sodium (Na) atoms in Ti_3C_2 using Density Functional Theory (DFT). The study will examine the diffusion pathways, activation energies, and electronic properties related to Na insertion and transport within the Ti_3C_2 matrix. By utilizing DFT calculations, we will analyze how the unique layered structure of Ti_3C_2 affects sodium ion mobility, which is essential for enhancing its performance as an electrode in sodium-ion batteries. The findings from this study will offer valuable insights into the fundamental mechanisms of Na diffusion, informing the design of more efficient electrode materials for sustainable energy storage solutions.

Published papers:

1) “Density Functional Theory Insights into NO Gas Sensing of Ti-Doped ZnO Monolayer with Oxygen Vacancy”, Z. Mahmoudi Gushkin, T. Ichibha, R. Maezono, M. Abbasnejad, Journal of Applied Physics, under revision.

層状物質 WTe_2 の超伝導特性の層間距離依存性に関する研究

一関工業高等専門学校　佐藤 和輝, 谷林 慧
JAIST　本郷 研太, 前園 涼
使用計算機: KAGAYAKI

層状物質 WTe_2は、遷移金属ダイカルコゲナイド（TMD）に分類される代表的な層状物質であり、トポロジカルワイル半金属の候補として近年大きな注目を集めている[1,2]。常圧下では超伝導は観測されていないものの、層間に金属原子や有機分子を挿入するコインターカレーション（co-intercalation）という手法によって、超伝導転移温度（T_c）が 3.8–5.6K の範囲で観測されるという報告がなされている[3]。さらに、高圧環境下においても WTe_2は超伝導状態を示すことが知られており、外的要因による電子状態の変化が T_c の発現に重要であることが示唆されている[4]。

本研究では、WTe_2のユニットセル構造を基盤に、電子ドーピングおよび層間距離の変化が超伝導特性に及ぼす影響を理論的に検討した。計算に基づく予備的な結果からは、電子格子相互作用と層間距離との相関性が、対数平均フォノン周波数(ω_{ln})を介して T_c に重要な影響を与える可能性が示唆されている。特に、層間距離の拡大によってフォノンの軟化が生じ、これが Tc の向上を妨げる要因となりうるという仮説が得られた。

来年度は、より精緻な第一原理計算やモデル構築を通じて、超伝導発現メカニズムの定量的解明を進める予定であり、本研究成果を基に原著論文の執筆と投稿を目指す。

引用文献

1. M. N. Ali et al., “Large, non-saturating magnetoresistance in WTe_2”, Nature 514, 205 (2014).
2. A. A. Soluyanov et al., “Type-II Weyl semimetals”, Nature 527, 495 (2015).
3. Y. Qi et al., “Superconductivity in Weyl semimetal candidate WTe_2 induced by potassium intercalation”, Phys. Rev. B 94, 054517 (2016).
4. Y. Zhou et al., “Pressure-Induced Superconductivity in a Three-Dimensional Topological Material WTe_2”, Nano Lett. 18, 7794 (2018).

発表論文

なし。

Enhancing Semantic Analysis through Instruction Fine-Tuning of LLMs

NGUYEN, Phuong Minh

School of Information Science, JAIST

Abstract

Recent progress in pre-trained language models has signi!cantly advanced semantic parsing tasks. However, a noticeable performance gap remains between English and other languages, primarily due to the limited availability of annotated non-English data. To address this disparity, our study introduces a novel framework for zero-shot multilingual semantic parsing. This approach involves augmenting multilingual datasets by leveraging labeled English data and training semantic parsers on the enriched corpus, with the support of large language models (LLMs) [2, 1]. In addition to semantic parsing, we explore the application of LLMs in the legal domain. By employing various prompting techniques, we analyze legal documents to tackle complex tasks such as legal textual entailment and information retrieval [4, 3]. Furthermore, we investigate how LLMs can be utilized to model human personality traits in multi-party conversations, aiming to enhance performance in emotion recognition tasks [5].

References

[1] Dinh-Truong Do, Minh-Phuong Nguyen, and Le-Minh Nguyen. "Enhancing zero-shot multilingual semantic parsing: A framework leveraging large language models for data augmentation and advanced prompting techniques". In: *Neurocomputing* 618 (2025), p. 129108.

[2] Truong Dinh Do, Phuong Minh Nguyen, and Minh Nguyen. "ZeLa: Advancing Zero-Shot Multilingual Semantic Parsing with Large Language Models and Chain-of-Thought Strategies". In: *Proceedings of the 2024 Joint International Conference on Computational Linguistics, Language Resources and Evaluation (LREC-COLING 2024)*. Ed. by Nicoletta Calzolari, Min-Yen Kan, Veronique Hoste, Alessandro Lenci, Sakriani Sakti, and Nianwen Xue. Torino, Italia: ELRA and ICCL, May 2024, pp. 17783–17794. !"#: https://aclanthology.org/2024.lrec-main.1547/.

[3] Chau Nguyen, Phuong Nguyen, and Le-Minh Nguyen. "Retrieve–Revise–Re!ne: A novel framework for retrieval of concise entailing legal article set". In: *Information Processing & Management* 62.1 (2025), p. 103949.

[4] Phuong Nguyen, Cong Nguyen, Hiep Nguyen, Minh Nguyen, An Trieu, Dat Nguyen, and Le-Minh Nguyen. "CAPTAIN at COLIEE 2024: large language model for legal text retrieval and entailment". In: *JSAI International Symposium on Arti!cial Intelligence*. Springer. 2024, pp. 125–139.

[5] Jieying Xue, Minh-Phuong Nguyen, Blake Matheny, and Le-Minh Nguyen. "BiosERC: Integrating Biography Speakers Supported by LLMs for ERC Tasks". In: *Arti!cial Neural Networks and Machine Learning – ICANN 2024*. Ed. by Michael Wand, Kristína Malinovská, Jürgen Schmidhuber, and Igor V. Tetko. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024, pp. 277–292. $%&': 978-3-031-72344-5.

Advancing Large Language Model Efficiency through Pruning and Speculative Decoding

School of Information Science, Nguyen laboratory,
Do Dinh Truong (2320435)
Machine: KAGAYAKI

Abstract

Large language models (LLMs) have revolutionized natural language processing by enabling advanced tasks such as multilingual understanding and complex reasoning, but their immense scale—often spanning billions of parameters—comes at the cost of substantial computational and memory demands. This creates serious challenges for deploying LLMs in real-time applications, on edge devices, or in low-resource settings. My research addresses these issues by developing methods to make LLMs both **smaller and faster**, combining pruning and compression techniques to slim down models with algorithmic approaches like speculative decoding that accelerate generation. A key part of this work has been made possible through extensive use of the **KAGAYAKI high-performance computing cluster** at JAIST, which provides the GPU resources needed to train and evaluate large models, run massive pruning experiments, and perform speculative decoding trials. As depicted in Figure 1, speculative decoding changes the conventional step-by-step generation by first drafting multiple tokens and then verifying them in parallel with the full model, substantially reducing latency. Through these efforts, I aim to advance the efficiency of language models so that their powerful capabilities can be practically realized even in environments with limited computational resources.

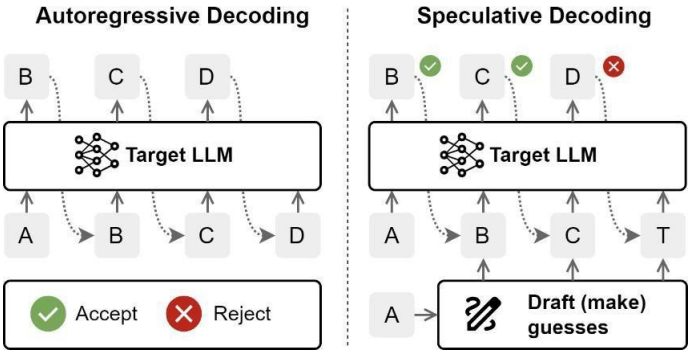


Fig. 1: Autoregressive decoding (left) vs. speculative decoding (right). Autoregressive decoding generates one token per step; speculative decoding generates three per step.

Published papers

1) **Do, Dinh-Truong**, Nguyen-Khang Le, Minh-Le Nguyen. "SPECTRA: Faster Large Language Model Inference with Optimized Internal and External Speculation." *The 63st Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics. ACL 2025.*
2) **Do, Dinh-Truong,** Kiyoaki Shirai, Minh-Le Nguyen. "WIP: Iterative Post-Training Pruning with Weighted Importance Estimation for Large Language Models." The 30th International Conference on Natural Language & Information Systems. NLDB 2025.
3) **Do, Dinh-Truong**, Minh-Phuong Nguyen, Minh-Le Nguyen. " PruneSLU: Efficient On-device Spoken Language Understanding through Vocabulary and Structural Pruning." The 26th Interspeech Conference. INTERSPEECH 2025

Mechanistic Interpretability on Modern Large Language Models

趙 羽風 (Hakaze Cho)
井之上研究室
Machine: Kagayaki GPU Clusters

Abstract

This research series aims to uncover the intrinsic mechanisms of modern Transformer-based language models, with a particular focus on the phenomenon of in-context learning. Specifically, we strive to attribute the functioning of language models to their individual components and to identify interaction patterns among these modules. In other words, we attempt to restore the functionality of the language model to a circuit composed of several modules, aiming for a mechanical-like approach: when we seek to control the model's functionality, we can modify or replace these "components" without re-training the models. This approach is known as mechanistic interpretability.

In April 2024 – March 2025, our research achievements have been widely presented at both domestic and international conferences (**note that our research field does not focus on journal publications**), with a cumulative impact factor >70. Notably, one of our works was accepted at the top-3 international conference **ICLR** (with an impact factor of approximately 50, the first student-made acceptance in JAIST).

Published papers:

1) **Hakaze Cho**, M Kato, Y Sakai, Naoya Inoue. "Revisiting In-context Learning Inference Circuit in Large Language Models". The Thirteenth International Conference on Learning Representations (**ICLR**). 2025. **[h5=304, IF=48.9, CORE: A+]**
2) **Hakaze Cho**, Y Sakai, M Kato, Kenshiro Tanaka, Akira Ishii, Naoya Inoue. "Token-based Decision Criteria Are Suboptimal in In-context Learning". The 2025 Annual Conference of the Nations of the Americas Chapter of the ACL (**NAACL**), main conference. 2025. **[h5=132, IF=16.5, CORE: A]**
3) **Hakaze Cho**, Y Sakai, K Tanaka, M Kato, Naoya Inoue. "Understanding Token Probability Encoding in Output Embeddings". The 31st International Conference on Computational Linguistics (**COLING**): main conference. 2025. **[h5=65, IF=7.7, CORE: B]**
4) **趙羽風**, 加藤万理子, 坂井吉弘, 井之上直也. "大規模言語モデルにおける In-context Learning の推論回路". 言語処理学会第 31 回年次大会. 2025.
5) **趙羽風**, 井之上直也. "Beyond the Induction Circuit: A Mechanistic Prototype for Out-of-domain In-context Learning". 言語処理学会第 31 回年次大会. 2025.
6) **趙羽風**, 坂井吉弘, 加藤万理子, 井之上直也. "StaICC: 文脈内学習における分類タスクの標準的なベンチマーク". 言語処理学会第 19 回 YANS シンポジウム. 2024.

7) **趙羽風**, 坂井吉弘, 加藤万理子, 田中健史朗, 石井晶, 井之上直也. “In-Context Learning におけるトークンベース較正手法の用いる決定境界は最適でない”. 情報処理学会 NL 研第 260 回研究発表会. 2024.
8) Hakaze Cho, Naoya Inooue. “StaICC: Standardized Evaluation for Classification Task in In-context Learning”. Pre-print. 2025.

メタン酸化カップリング反応に有用な触媒の機械学習を用いた探索

JAIST 先端科学技術研究科 情報科学系
谷口 稜
崎間　寛哉
使用計算機：KAGAYAKI

＜概要＞

AFSA（afsa.jp）が主催する触媒コンペティションにおいて、従来の化学的手法に替わり、新たなアプローチとして機械学習を組み合わせた手法を用い、エチレンを効率的に生成するための触媒候補を探索した。エチレンは工業において重要な化合物の一つであり、合成繊維・ビニール・断熱材・絶縁体・農業資材・建築材料・水道パイプ等の材料となる、塩化ビニル・アクリルニトリル・酢酸ビニルを製造する上で欠かせないものである。このエチレンを、メタンから成る天然ガスから生成する手法として、メタン酸化カップリング反応（OCM: Oxidative coupling of methane）がある。しかし、この反応において多くのメタンは反応の過程で燃焼してしまい、一酸化炭素や二酸化炭素となることで、エチレンの生成量は大きく減少する問題がある。この問題を解決するため、より効率的な反応を推進する触媒が求められている。触媒とは 3 個以下の元素と 1 つの担体を組み合わせたもので、低エネルギー（熱）で目的の物質をより多く回収することに寄与するものである。しかし、触媒となりうる元素・担体の候補は非常に多く存在し、それら全ての組み合わせについて実験評価するのは難しい。現行の触媒開発手法は、化学者が経験やアイデアを元に候補を導き出すものであるが、未だ解明されていない反応メカニズムも多く、その課程は非常に困難なものである。そこで本研究においては、機械学習を用いた手法による新たな触媒開発に取り組んだ。過去の触媒の評価データを学習したモデルにより、新たな組み合わせの収率（入力した天然ガスに対して得られるエチレンの比率）を予測することで、約 220 万通りの候補を全て探索し、高収率が予測される新たな触媒候補を発見した。本研究を進めるうえで、KAGAYAKI の GPU ノードを用いたことにより、非常に高速に推論結果を得ることができ、インタラクティブ的にパラメータの改善を繰り返すことで、設計したモデルの改善を行うことができた。

＜評価＞

探索した触媒候補は、コンペティション運営委員会により収率の計測が行なわれた。結果は 13.9%でありコンペティションにおいて 3 位に入賞した。また、通常はメタン酸化カップリング反応の触媒としては用いることのない、鉛を組み合わせた触媒を発見することができ、非常に興味深い結果となった。

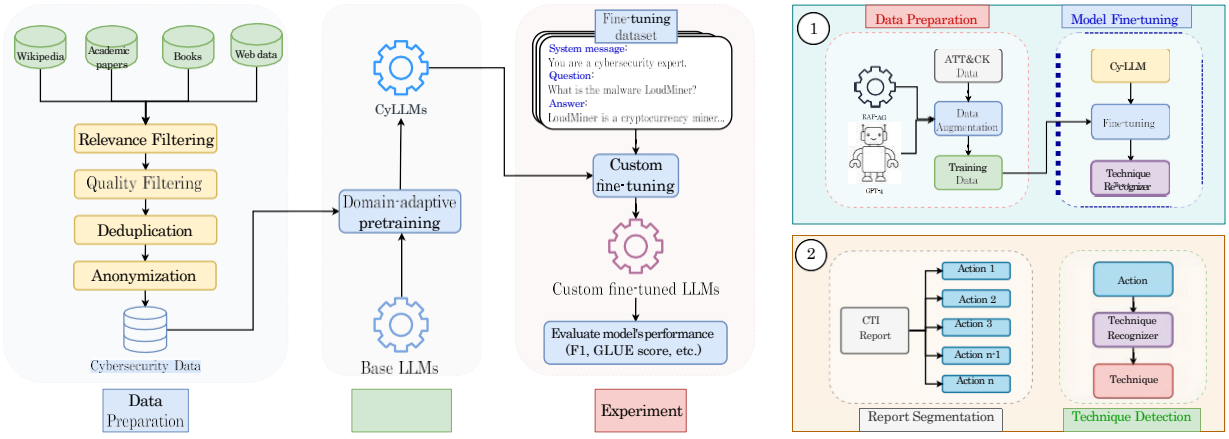
Large Language Model-based cybersecurity research

Information of Science,
Beuran Lab,
MAI, Trong Khang

Machine:: HPC System, KAGAYAKI (kagayaki)
Large Memory PC Cluster - superdome-(lmpcc)

Abstract

Large Language Models (LLMs) with high language capacity have been used in many applications. In cybersecurity, we can use these models to resolve tasks that are related to language such as Cyber Threat Intelligence (CTI) report analysis, cybersecurity chat agents, etc.



In the left picture, we collected the data for the pretraining process of LLMs. We then conducted the pretraining process in H100 computer to create cybersecurity-specific models. And then, in the evaluation process, we fine-tuned these models in A100 computers to acquire the problem-solving capacity in cybersecurity tasks.

In the right picture, open-source LLM is fine-tuned (with A100 computers) to be able to recognize attacking techniques from the text. The fine-tuned LLM is then used in the analysis process of CTI reports to transform the report into simplified versions.

Published papers:

1) CyLLM-DAP: Cybersecurity Domain-Adaptive Pre-training Framework of Large Language Models (This paper is published in ICISSP2025 conference)
2) LLM-based Cyber Threat Intelligence Report Analysis (This paper is published in SCIS2025 conference)

Obtained budget:

1) JAIST Foundation Research Grants. This budget is used for the ICISSP2025 conference attendance

3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

機械学習ポテンシャルによる Ziegler-Natta 触媒に関する研究

所属・氏名　谷池研究室・筑間弘樹

Ziegler-Natta（ZN）触媒は代表的な重合触媒であり、ポリオレフィン生産の中心的な役割を担っている。その構造単位は「一次粒子」と呼ばれ、活性点の前駆体である $TiCl_4$ と、担体である $MgCl_2$ から構成される。さらに、多くの場合、ポリマーの立体選択性を高めるための改質剤として内部ドナー（ID）が加えられる。ZN 触媒の構造は、$TiCl_4$ と内部ドナーで終端された $MgCl_2$ ナノプレートから成ることが広く知られているが、その詳細な構造を実験的に明らかにするのは非常に難しい。この問題に対して、本研究室では、遺伝的アルゴリズム（GA）と密度汎関数法（DFT）を組み合わせることで、実験データに依存せずに ZN触媒の分子モデルを構築する手法を開発している。こうしたアプローチにより、実際の触媒系の構造や特性をより正確に再現できるモデリングを目指す。ここで、モデリングにおける最大の律速は計算化学シミュレーションに広く使われる密度汎関数法（DFT）計算の計算コストである。これは系内の電子数の 3 乗に比例して大きくなるため、既存の計算法では実触媒スケールでの構造決定は不可能であった。そこで、本研究では高次元ニューラルネットワークポテンシャル（HDNNP）と呼ばれる機械学習によって DFT 計算を再現する手法の導入により、計算高速化に取り組んだ。昨年度は、複数の組成（$TiCl_4$ 吸着数）にまたがって適用可能な HDNNP の構築に成功した。本モデルの学習には、異なる数の $MgCl_2$ ユニットと TiCl4 分子を含む複数の系からなるデータセットを用いた。構築した HDNNP を用いて、$TiCl_4$ の被覆量が安定性や活性点の分布に与える影響を調べ、準安定構造の解析から、$TiCl_4$ 被覆量が増えるにつれて触媒の立体選択性が向上する明確な傾向を確認した。

また、$MgCl_2/TiCl_4$/ID 系に対する HDNNP を構築し、構造決定を実施した。当研究室で実施した過去の DFT および GA を用いた研究では、$19MgCl_2/4TiCl_4$/5 ジエチルフタレート（DEP）系における重要な構造的特徴が特定されたが、計算コストの制約によりその探索範囲は限定的であった。本研究では HDNNP の構築によりその制約を克服し、より広範なパラメータ空間を探索した。この拡張された探索により、これまで報告されていたものよりより安定な構造が発見された（Figure 1）。

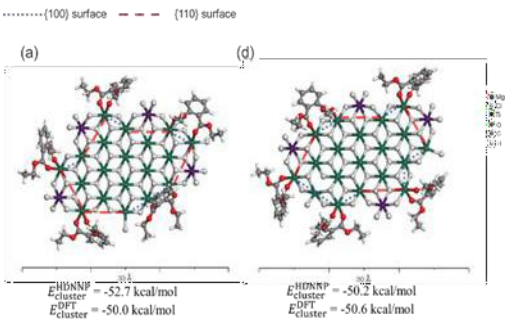


Figure 1. a) HDNNP によって決定された構。b) DFT によって決定された過去に報告された構造。!(!"}$'!&' は DFT によって評価された構造のエネルギーに対応しており、新規に得られた構造が既報

のものより 2.5 kcal/mol 安定であることが示されている。

共有計算サーバは、構造決定および HDNNP 構築に活用された。HDNNP のデータセット構築のための DFT 計算には多大な計算量を要し、GA を行うためには効率的な並列計算が不可欠である。本成果は筆者の博士学位論文で報告されている。

Ab initio modeling of the heterogeneous Ziegler-Natta catalyst via machine learning

Graduate School of Advance Science and Technology, Taniike Lab, 筑間 弘樹, João Marcos da Silveira

Machine: Kagayaki

Abstract

The heterogenous Ziegler-Natta catalyst (ZNC) is the most important catalyst for the polymerization of olefins. Our group applied a combination of genetic algorithm (GA) and Density Functional Theory (DFT) to perform ab initio structure determination of the ZNC, obtaining a database of stable structures that was able to replicate the increase in occupancy of the positions next to $TiCl_4$ with the amount of internal donors (IDs). In order to further connect the theoretical results with experiments, frequency calculation (Materials Studio-DMol3) of the structures in the database allowed a thorough study of the potential for IDs' C=O stretching vibration to be used in the investigation of the catalyst's surface. We were able to establish that the broad experimental absorption peak in the 1700–1600 cm^{-1} region can be deconvoluted into several peaks that depend on the local environment surrounding $TiCl_4$, with chelating molecules in general having higher frequency of vibration than bridging (Figure 1), potentially supporting the study of the active site via spectroscopy.

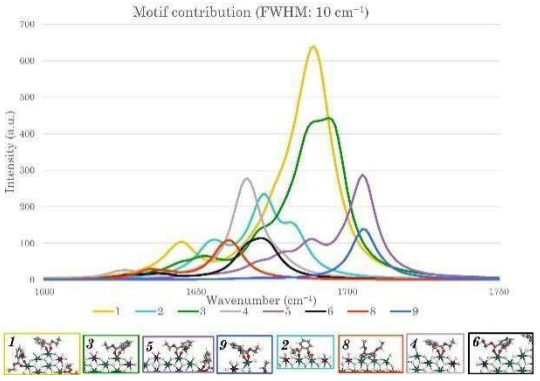


Figure 1. Calculated IR absorption bands of the most prominent local environments in the whole database.

Concurrently, we have also made efforts to increase the size of the structures to a more realistic scale of 50 $MgCl_2$ units. For this, High Dimensional Neural Network Potentials (HDNNP) are being used in an effort to replace DFT (Materials Studio-DMol3) as the energy evaluating method due to the latter's computational cost. Firstly, we have successfully applied the method to $50MgCl_2/4–13TiCl_4$ clusters, observing similar trends seen in experiments, in regards to the effect of $TiCl_4$ amount on stereospecificity and activity. Finally, we applied HDDNP-GA to ID-containing systems (Figure 2), which required adaptive sampling to iteratively diversify the environment. As a result, HDNNP-GA was able to explore a conformational space 12 times larger than DFT-GA, and found structures 2,6 kcal/mol more stable, making progress as a viable strategy for the structure determination of complex systems.

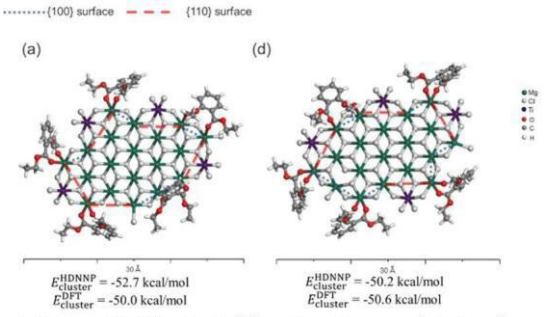


Figure 2. Most stable structures obtained by HDNNP-GA (left) and DFT-GA (right).

Presentation

"Spectroscopic study of Ziegler-Natta catalysts via non-empirical structure determination", João Marcos da Silveira, Hiroki Chikuma, Gentoku Takasao, Toshiaki Taniike, 第 54 回石油・石油化学討論会, 広島, 2024 年 11 月 28-29 日, 一般口頭.

特徴量設計技術に基づく機械学習を用いたメタン酸化カップリング触媒の開発

先端科学技術研究科 谷池研究室・藤原綾

使用計算機: KAGAYAKI

概要

今年度は、谷池研究室で開発した特徴量設計技術（AFE）を使用するなかで、特徴量の刈込を、フーバー回帰を用いた遺伝的アルゴリズム（GA）により行った。これについて原著論文を出版し、学会発表を行い、結果を卒業論文にまとめた。

本研究では、過去に得た OCM 触媒反応データセットを基データとして、自動的に適切な特徴量を構築し選択する触媒開発法を、実際に研究で用いて確立することを目的とした。

谷池研究室で開発した AFE では、まず、M1-M2-M3/Support という複数の元素が担持された触媒に於いて、M1-M2-M3 の順番に依らず学習を行うため、各元素特徴量の可換演算（最小値、最大値、積、平均、標準偏差）を計算することによって 3 元素の組み合わせを表現している。さらに非線形を 12 種類（x (original)、1/x、sqrt x、1/sqrt x、x^2、1/ x^2、x^3、1/ x^3、ln x、1/ ln x、exp x、1/ exp x）考慮し、多くの特徴量を生成したのち、フーバー回帰を用いた遺伝的アルゴリズム（GA）による刈込を行った。これらの操作により、最終的に 8 特徴量で収率を計算する仮説式が得られる。少量のデータでも固体触媒の複雑な組成と収率との関係を、事前知識なしで設計することが可能である。具体的には、図 1 のように AFE とハイスループット触媒評価装置（HTE）を組み合わせたアクティブ・ラーニングによって触媒空間の探索を行った。このように研究ループを繰り返した。ここでは科学者がこれまで思考と実験を繰り返していたように、機械学習においても思考と実験の過程がある。思考では AFE による仮説式の獲得があり、さらに最遠点サンプリングによって現状のデータライブラリに最も不足している触媒組成を導出する。実験の過程ではHTE を用いた実験を行い、統一的なデータセットを手に入れた。また、何度もデータ追加とAFE を繰り返す過程での仮説式の変遷を可視化し、その仮説式が収束していく過程を追った。これにより、データ駆動型の触媒研究において、事前知識なしで触媒を発見する工程を明示した。

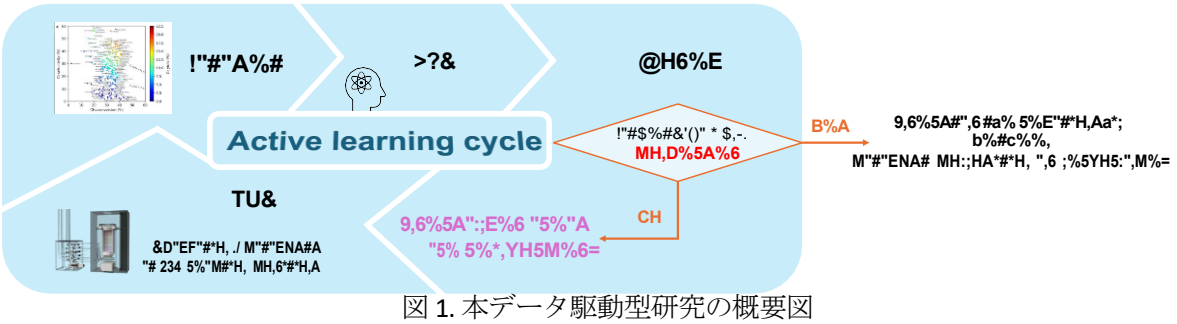


図 1. 本データ駆動型研究の概要図

【関連発表・論文】

1) Science and Technology of Advanced Materials 2024, 26, 2454219.
2) Acquisition of catalyst design rules through feature engineering, Aya Fujiwara, Sunao Nakanowatari, Toshiaki Taniike, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Mongolia 2024, Ulaanbaatar, Mongolia, Aug. 28–Sep. 1, 2024, poster.

Influence of Humidity on Layer-by-Layer Growth and Structure in Coordination Networks

School of Materials Science,
Nagao Lab, Yuki Nagao, Kentaro Aoki
Machine: Large Memory PC Cluster

Materials Studio was employed to analyze and model the molecular and structural properties of metal-organic frameworks (MOFs) in the study of humidity effects on layer-by-layer (LbL) growth. The software was used to construct and simulate the coordination networks, particularly focusing on Zn-TCPP-bpy frameworks, providing insights into the influence of water coordination and organic linker substitution.

Using Materials Studio, a model of the Zn-TCPP-bpy (TCPP: tetrakis-(4-carboxyphenyl)-porphyrin, bpy: 4,4'-bipyridyl) coordination network was built based on experimental X-ray diffraction (XRD) and grazing-incidence X-ray scattering (GI-XRS) data as shown in Figure 1. The constructed model aligns with the periodic network observed in the experimental study. The unit cell was refined with parameters a = b = 1.70 nm and c = 1.40 nm under space group P4/mmm. The Zn^{2+} dimers coordinated with four -COO^- groups of TCPP to form the paddlewheel-type 2D layer, while 4,4'-bipyridyl (bpy) molecules bridged the layers via coordination with Zn^{2+}.

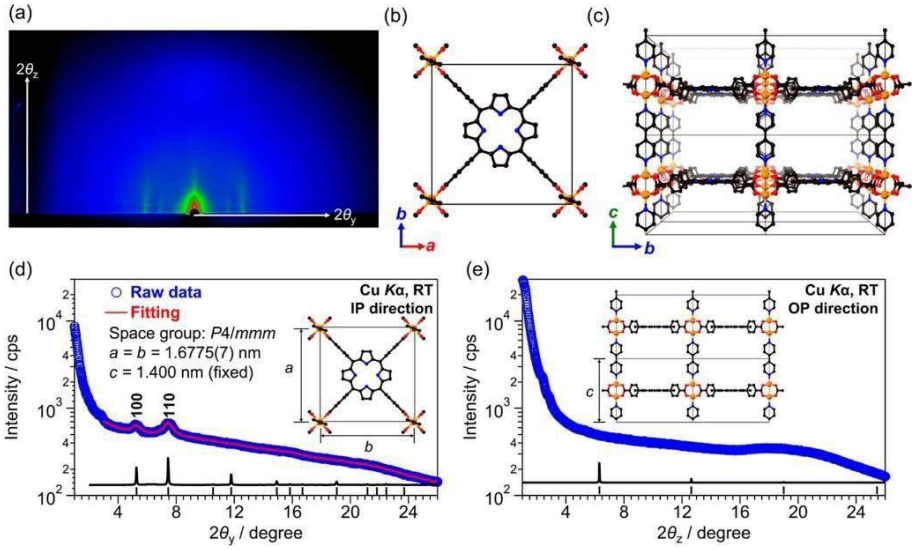


Figure (a) 2D GI-XRS image of the Zn-TCPP-bpy thin film. (b,c) Constructed model structure of [Zn_2(TCPP)(bpy)] under space group $P4/mmm$ viewed along the (b) c-axis and (c) a-axis, respectively (orange, Zn; red, O; blue, N; and black, C). H atoms are omitted for clarity. Panels (d,e), respectively, portray 1D projected profiles of panel (a) in (d) IP direction and Le Bail fitting results and (e) OP direction. Black ticks correspond to $hk0$ and $00l$ diffractions of the simulated patterns.

Published paper:

K. Aoki, T. Matsuzawa, K. Suetsugu, M. Hara, S. Nagano, Y. Nagao, *Inorg. Chem.* **63**, 6674 (2024).
http://dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.3c04526

ポリマー1 分子の直視
ポリ擬ロタキサン鎖一本の高速 AFM イメージング

マテリアルサイエンス系 篠原研究室
堀 諒雅、篠原 健一
使用計算機：HPC System "KAGAYAKI"

近年、これまでにない特異な機能を発現することから、超分子材料が注目されている。中でも、環成分に α-シクロデキストリン（α-CD）を、軸成分にポリエチレングリコール（PEG）を用いた擬ロタキサンは成分を混合し静置するだけで容易に調製可能であることから、超分子材料の研究において広く利用されている。しかし、擬ロタキサンの調製条件では溶解性が低いため、調製した擬ロタキサンを水に再溶解した場合には脱包接が起こるため、ポリ擬ロタキサンの溶液 NMR による評価は困難である。そこで、本研究では高速原子間力顕微鏡（高速 AFM、FS-AFM）を用いて、高分子量 PEG および α-CD から成るポリ擬ロタキサンの直接観察を試みた。

サンプルの調製は以下の手順で行った。PEG（分子量 10 万）を飽和 α-CD 水溶液に入れ（$c = 1.0$ gL^{-1}）、30 分間超音波攪拌した後、一日以上静置して擬ロタキサンを調製した。得られた擬ロタキサンを遠心分離して、上澄みを除去し、蒸留水を加えて軽く振盪して白色固体を洗浄した。高速 AFM用サンプルは、得られた白色固体を少量取り、蒸留水を加えて振盪した後、可溶部を劈開したマイカ基板にドロップキャストして調製された。15 mM KCl 水溶液中でイメージングした結果、長さ 489 nm、高さ 0.97 nm のひも状分子が確認された（**Fig.1 A**）。この結果は、MM 計算の結果と比較して十分なサイズであり、α-CD が PEG を包接した擬ロタキサンであると考えられる。また、対照実験として PEG の高速 AFM イメージングを行ったところ、擬ロタキサンとは異なり、自己凝集した分子が確認された。一般に、α-CD-PEG 擬ロタキサンは水に溶解することで、脱包接するとされているが、本実験で CD を含まない水溶液中でポリ擬ロタキサンが確認されたことから、高分子量ポリ擬ロタキサンの脱包接はゆっくりと進行していると考察される。これは、ポリ擬ロタキサン末端に存在する、包接されていないエチレングリコール鎖が影響していると考える。対照実験の通り、α-CD に包接されていない PEG は自己凝集する。したがって、ポリ擬ロタキサン鎖末端のポリエチレングリコールユニットが自己凝集し、末端封鎖の役割をしていると予想される。この仮説について MD 計算を用いて検証を行った。20 量体 PEG の中心に α-CD を 2 つ包接して計算したところ、考察通り、未包接のポリエチレングリコール末端が自己凝集し、嵩高い末端封鎖剤のようになっている様子が確認された（**Fig.1 B**）。

関連発表論文

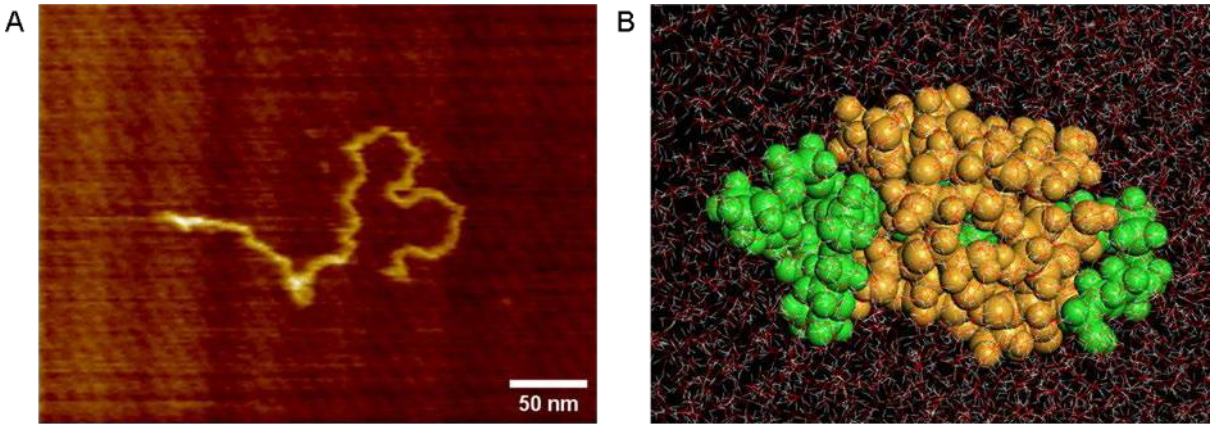


Fig. 1 (A) A snapshot of FS-AFM video of α-CD–PEG pseudopolyrotaxane on mica under 15 mM KCl aq. (B) A snapshot of all-atom MD simulation of pseudopolyrotaxane composed of 2 α-CD molecules and PEG 20-mer.

1) R. Hori, K. Shinohara, Direct Observation of "End-Capping Effect" of a PEG@α-CD Polypseudorotaxane in aqueous media. *Macromolecules*, **2025**, *in press*.

分子動力学シミュレーションを用いた脂質フリップを誘起する膜貫通ペプチド二量体の膜内構造解析

所属・氏名：北陸大学薬学部・齋藤大明

使用計算機: Kagakayki

【序論】

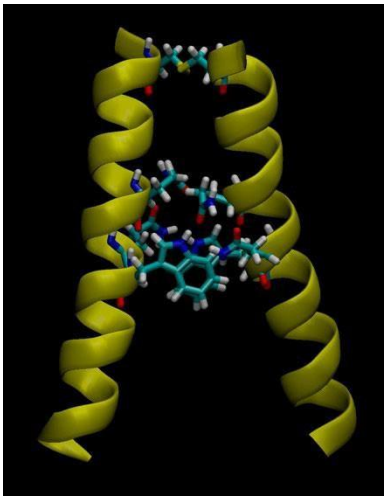
脂質二重層中のリン脂質分子の二層間の移動（フリップフロップ）は，親水性の頭部基が疎水性の炭化水素領域を通過しなければならないため，脂質のみの人工膜ではほとんど起こらない現象である．脂質スクランブリングは様々な細胞機能の発現・維持に関与しているものの，その構造的特徴は未だ明らかにされていない．

我々は時分割中性子小角散乱法を用いて，Leu と Ala の繰り返し配列からなるモデル膜貫通ペプチドが，POPC のフリップフロップを促進しないものの，配列中央の Leu 残基を Glu 残基に置換するとフリップフロップを促進することを示してきた．この配列中央の Glu 残基への置換は、置換する残基の数や位置によってスクランブリング活性は変化することが知られている。また、ペプチドをジスルフィド結合で二量体化することで、よりスクランブリング活性が上昇することが知られているが、活性上昇に関与する膜内構造は明らかとされていない。

そこで本研究では，ペプチド二量体の中央に Glu 残基を複数導入した膜貫通ペプチドの分子動力学（MD）シミュレーションを実行し、ペプチドの膜内における特徴的な構造の振る舞い（分子配向や Glu 残基の膜内位置、膜内構造の安定性）を詳細に解析し、スクランブラーゼ活性に与える影響について考察する。本報告ではジスルフィド結合の位置を変えた Glu を２残基持つペプチドを４種類、Glu を３残基持つペプチドを１種類モデリングし、これら膜貫通ペプチドを POPC 脂質膜に導入した結果について報告する。

【方法・結果】

MD シミュレーションは全て定温・定圧条件下(T=303K, P=1atm)で実行した。脂質の力場には CHARMM36 を用い，水のモデルは TIP3 を用いた。解析は、膜厚方向に対する原子分布や、ペプチド間の結合特性も評価した。また、各モデル膜貫通ペプチドの POPC 膜の膜厚方向に対する配向や、ペプチド二量体間の角度の特性評価した。MD・計算には GROACS2018 を用いた。



右図に実験でスクランブラーゼ活性が強く現れたモデルペプチドを POPC 膜に挿入した系におけるスナップショット構造を示す。ペプチドは MD シミュレーションの間、２量体構造を保持し続け、ペプチドの配向角度やペプチド間の角度も制限されていた。また、図に示されているように、ペプチド間の Glu や Trp 残基間で得意的な相互作用が生じていることが示された。このような特性は他の活性が強いモデルペプチドでも観測されたことから、ペプチドの二量体形成の保持がスクランブラーゼ活性における重要因子であることが示唆された。

関連発表論文（査読あり）

1) Hiroyuki Nakao, Toshiki Tsujii, Hiroaki Saito, Keisuke Ikeda, Minoru Nakano, “Synergistic effects of hydrophilic residues in the transmembrane region on lipid scrambling activity of dimeric helices”, Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 251, 114612, (2025).

2) Takashi Kamei, Jun Miyazaki, Ryoga Hori , Hiroaki Saito, Tatsuo Takahashi, Ken-ichi Shinohara, Masakazu Miura, Hirokazu Suzuki,, "Spectral and HPLC Analyses of Synthesized Butin and Butein", Chem. Pharm. Bull., 72, 7, 648–657 (2024).
3) Honami Echizen, Kenjiro Hanaoka, Kazuhito Shimamoto, Ryota Hibi, Sachiko Toma-Fukai, Hisashi Ohno, Eita Sasaki, Toru Komatsu, Tasuku Ueno, Yukihiro Tsuchiya, Yasuo Watanabe, Takao Otsuka, Hiroaki Saito, Satoru Nagatoishi, Kouhei Tsumoto, Hirotatsu Kojima, Takayoshi Okabe, Toshiyuki Shimizu, & Yasuteru Urano, “Discovery of a cystathionine γ-lyase (CSE) selective inhibitor targeting active-site pyridoxal 5′ -phosphate (PLP) via Schiff base formation” Scientific Reports 13, 16456 (2023)
4) Kengo Hayashi, Nobuki Kato, Khurram Bashir, Haruna Nomoto, Misuzu Nakayama, Andrea Chini, Satoshi Takahashi, Hiroaki Saito, Raku Watanabe, Yousuke Takaoka, Maho Tanaka, Atsushi J. Nagano, Motoaki Seki, Roberto Solano, Minoru Ueda, "Subtype-selective agonists of plant hormone co-receptor COI1-JAZs identified from the stereoisomers of coronatine", COMMUNICATIONS BIOLOGY (2023)6:320
5) Kazutomo Kawaguchi, Seiichiro Ito, Hiroaki Saito, Hidemi Nagao, “Molecular dynamics study of lipid bilayer asymmetry induced by ion concentration gradient and electronic polarizability”, *Molecular Simulation* (2022) 48:6, 477-483.
6) Naoki Kanoh, Ryusei Terashima, Hiromichi Nishiyama, Yuta Terajima, Shota Nagasawa, Yusuke Sasano, Yoshiharu Iwabuchi, Hiroaki Saito, Syusuke Egoshi, Kosuke Dodo, Mikiko Sodeoka, Chengqian Pan, Yoshinobu Ikeuchi, Shinichi Nishimura, and Hideaki Kakeya, “Design, Synthesis, and Antifungal Activity of 16,17-Dihydroheronamide C and ent-Heronamide C”, *The Journal of Organic Chemistry* (2021) 86 (23), 16249-16258.
7) Rina Saito, Kengo Hayashi, Haruna Nomoto, Misuzu Nakayama, Yousuke Takaoka, Hiroaki Saito, Souhei Yamagami, Toshiya Muto & Minoru Ueda, “Extended JAZ degron sequence for plant hormone binding in jasmonate co-receptor of tomato SlCOI1-SlJAZ”, Scientific Reports volume 11, Article number: 13612 (2021).

First-principles studies on the stability mechanisms of monolayer 1H-XS_2 with mixed transition metal elements based on density functional theory

Chi-Cheng Lee
Yamada-Takamura Group
School of Materials Science
Machine: Kagayaki

Abstract

Monolayer dichalcogenides have gained significant attention in recent years. We focus on studying the total energy competition and phonon instability among monolayer XS_2 compounds with X = Mo, Co, Tc, Ti, Ru, Nb, and Rh, in both pure and mixed forms having trigonal-prismatic coordination, dubbed as 1H-XS_2. For the mixed form, which corresponds to the high-entropy combination, extensive computations are required due to the large supercell size. While most unmixed 1H-XS_2 compounds are found to be dynamically unstable, they can be stabilized after being mixed to form high-entropy combinations. Not only can the total energy be lowered, but also the phonon instability can be eliminated. One key finding is that the energy lowering occurs at the level of total energy, without relying on the TS term in the Gibbs free energy. For the stability mechanisms, we find that, in most cases, the unstable vibrational modes diQer among the unmixed compounds, suggesting that the unstable vibrations can become stable with diQerent constituent elements. In Figure 1, we show that the eigen displacements of the originally unstable mode are modified after mixing. We also find that charge transfer plays an important role in stabilizing these systems.

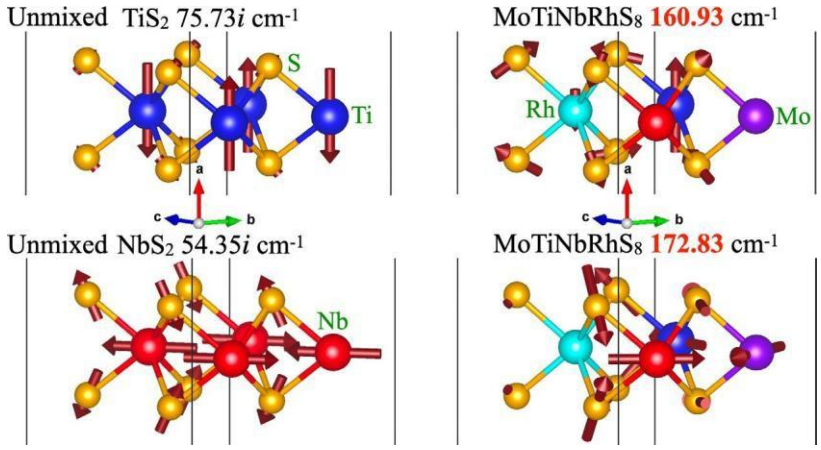


Figure 1 Comparison of the vibrational modes in pure TiS_2 and NbS_2 with those in the mixed compound of MoS_2, TiS_2, NbS_2, and RhS_2 ($MoTiNbRhS_8$). The frequencies are also given.

Published paper

1. Chi-Cheng Lee and Yukiko Yamada-Takamura, Physical Review B **111**, 035120 (2025).

Presented talk

1. The 23rd Workshop on First-Principles Computational Materials Physics, Taiwan (2025).

Zeeman 効果を利用したスピンデバイスに関する研究

先端科学技術研究科 小松 颯
ナノマテリアルテクノロジーセンター 赤堀 誠志
使用計算機: KAGAYAKI

概要

半導体エレクトロニクスはデバイスの微細化によって成長してきたが、今後微細化による成長は限界に達することが予想されている。そこで電子の電荷とスピンを用いて動作するスピントロニクスデバイスの 1 つである、スピン電界効果トランジスタ(スピンFET)が注目されている。スピン FET 実現のための課題の 1 つは、強磁性体(FM)と半導体(SC)の間のコンダクタンスミスマッチによって生じる、FM-SC 接合における低いスピン注入・検出効率である。

Zeeman 効果を利用したスピンデバイス(図 1(a))は 2 次元電子ガス(2DEG)の上に FM ナノ構造と MIS ゲートナノ構造を横並びに持っているデバイスであり、FM-SC 接合を介さずにスピン注入・検出が可能な手段として注目されているものの、未だに作製・動作実証されていない。

昨年度は、実際にデバイスを作製・動作実証するために、InAs/GaAs(001)の表面反転層による 2 次元電子ガスをチャネルとして用いたスピンデバイスの設計・性能評価を行った。今年度は、デバイスのチャネル材料としてInAs ナノワイヤを用いたスピンデバイスの設計・性能評価を行った。計算はシュレディンガー方程式を伝達行列法により計算することで行った。

ナノワイヤをチャネルとするデバイスでは、デバイス動作温度 0.5 K で-40~+27%、2.0 K で-24~11%、5.0 K で-12~4%のスピン偏極率が得られることが示した。これは、昨年度計算した 2DEG をチャネルとするデバイスに比べ、すべての温度において高いスピン偏極率であった。本成果より、チャネル構造の工夫によりスピンデバイスの温度耐性を向上できることが示され、この成果は発表 1 で報告した。

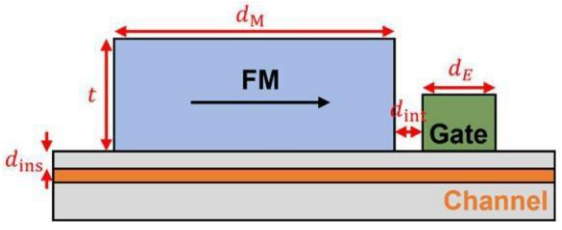


図 1 Zeeman 効果を利用したスピンデバイス

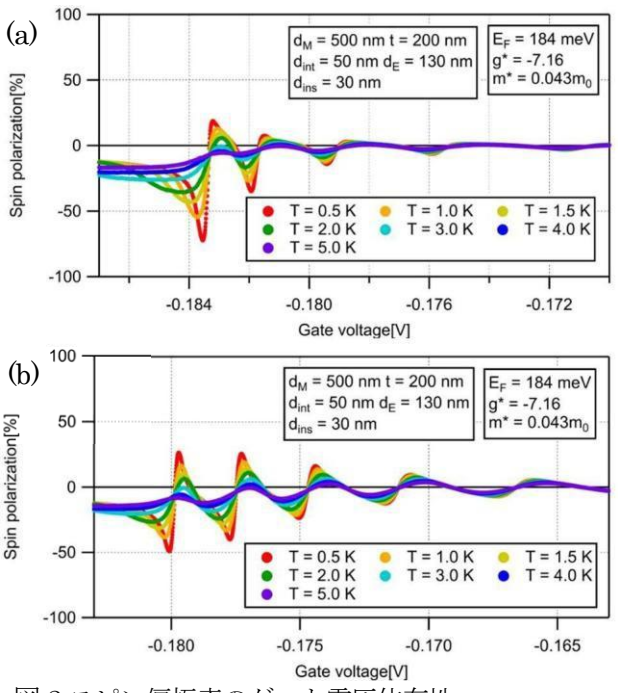


図 2 スピン偏極率のゲート電圧依存性
(a)2DEG チャネル (b)ナノワイヤチャネル

関連学会発表

1) S. Komatsu and M. Akabori, “Spin polarizer utilizing the Zeeman effect with InAs nanowire channel”, ISNTT 2024, We-43, NTT Atsugi R&D center, 12/2-6 (2024), Poster.

相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究

石川工業高等専門学校・佐野陽之
JAIST ナノマテリアル・デバイス研究領域・安東秀
使用計算機: Kagayaki

＜目的＞

相変化材料の自己保持性を利用した“高速で低消費電力な光スイッチ”（相変化光スイッチ）の開発が進められている。これまでの研究において、「相変化材料の相状態がよく分からず、予想される性能が出ない」「挿入損失が大きい」などの問題が生じている。そのため、本研究では、「低損失な相変化材料の物性及び相転移機構の理解」と「光スイッチ動作の完全な理解」を目的に研究を進める。

＜内容および研究成果（状況）＞

○低損失な相変化材料（MnTe）の第一原理計算

MnTe は変位型相変態を示す磁性半導体であり、光スイッチで利用される波長領域（1.5μm）で光吸収が非常に小さく、また高速に相転移が起こることが知られているため、相変化光スイッチの材料として有望である。MnTe の２つの結晶相であるα相とβ相の遷移過程について、Nudged Elastic Band (NEB)法を用いた遷移過程計算を行った。単純な線形補間の遷移過程計算でみられたα相ユニットセル体積におけるエネルギー障壁（約 0.2eV）が、NEB 計算では消失し、速やかにβ→α遷移が起こることが分かった。現在、格子定数をα相からβ相へ少しずつ変化させた場合の NEB 遷移過程計算を進めている。また、MnTeのα−β相転移の過程で、途中にβ’と呼ばれる特殊な結晶相を取ることが実験的に確認されており、このβ’の光学応答計算なども今後進めていく予定である。なお、この第一原理計算に関する研究は、JAISTナノマテリアル・デバイス研究領域の安東秀准教授との共同研究に基づいて実施している。

○MnTe を用いた相変化光スイッチ動作の物理シミュレーション

MnTe のα相及びβ相の光学特性を第一原理計算で求め、複素屈折率の虚部はほぼゼロであり、実部が相転移によって約 25%変化することが分かった。この屈折率変化によって実際に光スイッチが機能するかどうかを検証するために、MnTe 薄膜を含む Si 導波路を用いた Mach-Zehnder (MZ) 型光スイッチ３次元モデル構造の光伝搬物理シミュレーションを行った。ある程度の構造最適化を行うことによって、２か所の MnTe 薄膜の相状態を変化させると、２つの出口ポートの出力切り替えができることが実証できた。現在、光スイッチの消光比性能（オンとオフの時の透過率の比）について評価を行っている。また、MZ 型とは異なる別の方式の光スイッチ（例えば、リング共振器型）についても検討を行う予定である。

関連発表論文など （本研究に関連する研究発表等）

1) H. Sano and M. Kuwahara, “Multiphysics simulation of optical gate switch operation using a chalcogenide phase-change material”, Opt. Rev. 31, 474-486 (2024).
2) H. Sano, M. Kuwahara, H. Kawashima, H. Tsuda, G. Mizutani, T. An, “Optical Response Change due to Polymorphic Crystal-Crystal Transition of MnTe: Application to Phase Change Optical Switches”, International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2024 (ISOM’24), Himeji, Hyogo, Japan, October 20-23, 2024. Tu-E-36 (2024.10.22).
3) 佐野陽之、桑原正史、河島整、津田裕之、水谷五郎、安東秀、“MnTe 薄膜の結晶間相転移による光学応答変化”、応用物理学会 2024 年 9 月 16 日（オンライン）16p-A32-14.

分子シミュレーションを活用した糖鎖-タンパク質相互作用のダイナミクスの解析

マテリアルサイエンス· 山口拓実

使用計算機: KAGAYAKI

概要

糖鎖は 核酸·タンパク質と並ぶ第 3 の生命鎖と呼ばれる。糖鎖は医療のターゲットとしても注目されており 病気原因の解明や治療等へ応用するためにも 糖鎖の理解は役立3ものと言える。しかし 糖鎖に関する研究は 核酸やタンパク質と比べて十分に進んでいない。私たちは 計算科学手法を用いて 糖鎖の構造や機能を解明することに取り組んでいる。糖鎖が機能を発揮するには 自身の化学構造に加え 水和構造が重要な役割を果たしていると考えられる。そこで 分子動力学（MD）シミュレーションを用いて 溶液中の糖鎖の水和挙動を明らかにすることに取り組んだ。

MD シミュレーションには KAGAYAKI を利用し GENESIS または AMBER プログラムパッケージを使用して行った。また 統計的な解析は R を使用して実施した。

細胞内のタンパク質の品質管理に関わるオリゴ糖鎖を対象に MD シミュレーションを行なった。得られた大規模データを使い 糖鎖と水との間の水素結合と 糖鎖周囲の水分子間の水素結合に3いて調べた。その結果 特定の糖残基間を架橋する水和水が見3かった。また こうした特徴的な水和水が 近傍の水分子の挙動にも影響を与え 糖鎖周囲の水の構造化が促されることが示唆された。得られた知見を基に 人為的な配列をも3様々な糖鎖をデザインし MD シミュレーションにより比較した。その結果 近傍の水の挙動に与える影響も変化することがわかった。水和構造の制御を通した 糖鎖のマテリアル応用の可能性も期待される。

関連発表

1) Chythra J N, O. Guvench, A. D. MacKerell Jr, T. Yamaguchi, S. S. Mallajosyula, “Refinement of the drude polarizable force field for hexose monosaccharides: Capturing ring conformational dynamics with enhanced accuracy,” *J. Chem. Theory Comput.*, 20, 9161–9177, 2024.
2) Y. Zhang, T. Yamaguchi, “Classification of conformational dynamics of high mannose-type oligosaccharides by molecular simulation and data clustering,” *21st IUPAB Congress 2024*, 京都, 2024 年 6 月.
3) T. Yamaguchi, H. Tatsuoka, K. Kato, S. S. Mallajosyula, “Capturing the hydration dynamics of oligosaccharides using molecular simulations and NMR measurements,” *Glyco-core Symposium 2024*, 名古屋, 2024 年 7 月.
4) 山口拓実, “オリゴ糖鎖の描像と制御：知る·使うから 3くるまで,” *第 11 回分子サイバネティクス·第55回分子ロボティクス定例研究会*, 金沢, 2024年7月.
5) 古原正康, 山口拓実, “分子シミュレーションによる糖鎖と水の相互作用解析,” *第 43 回日本糖質学会年会*, 横浜, 2024 年 9 月.
6) M. Furuhara, T. Yamaguchi, “Elucidation and control of the hydration structure of carbohydrates based on molecular dynamics simulations,” *International Symposium on Exponential Biomedical DX 2024*, 能見, 2024 年 12 月.
7) 古原正康, 山口拓実, “溶液中の糖鎖の水和構造の解明を目指した分子シミュレーション,” *R6 年度 生物物理学会中部支部討論会*, 名古屋, 2025年3月.

4. 謝辞

JAIST の並列計算機利用者メーリングリストである MPC メーリングリストを通じて各計算機利用者へ報告書の作成を依頼し，これに応じて頂いた各著者のご厚意によって，本報告書を取りまとめることができました.

ご多忙のところ，報告書の作成にご協力を頂いた著者各位に心から感謝致します.