

## センター利用による研究成果

—平成 27 年度計算機利用結果報告書から—

### 【1301 医用生体工学・生体材料学】

1. Kanehiro Matsuyama, Yasuhiro Ishidou, Yong-Ming Guo, Hironori Kakoi, Naohiro Shinohara, Yuhei Yahiro, Ichiro Kawanura, Takao Setoguchi, Shingo Maeda, Setsuro Komiya : Prediction of the Long-term Course of the Cementless Femoral Stem Based on Finite element Analysis and Mid-term Radiological Evaluation : The Orthopaedic Research Society (ORS) 2015 Annual Meeting, 2015
2. 石堂康弘, 松山金寛, 瀬戸口啓夫, 梶博則, 廣津匡隆, 郭永明, 小宮節郎 : X 線学的評価に基づく有限要素解析によるセメントレスシステムの長期経過予測 : 第 88 回日本整形外科学会学術総会, 2015
3. 松山金寛, 石堂康弘, 郭永明, 他 : 中期的 X 線学的評価に基づいたセメントレスシステムの有限要素解析と長期的 X 線学的評価の検証 : 第 46 回日本人工関節学会, 2016
4. Kanehiro Matsuyama, Yasuhiro Ishidou, Yong-Ming Guo, Hironori Kakoi, Naohiro Shinohara, Yuhei Yahiro, Ichiro Kawamura, Takao Setoguchi, Shingo Maeda, Setsuro Komiya : Finite Element Analysis of Cementless Femoral Stem Based on Mid-term and Long-term Radiological Evaluations : The Orthopaedic Research Society (ORS) 2016 Annual Meeting, 2016

### 【2202 自然災害科学】

5. Asano, K., H. Sekiguchi, T. Iwata, M. Yoshimi, T. Hayashida, H. Saomoto, and H. Horikawa : Modelling of wave propagation and attenuation in the Osaka sedimentary basin, western Japan, during the 2013 Awaji Island earthquake : Geophysical Journal International, Vol.204, No.3, pp.1678 - 1694, 2016

### 【4304 数理物理・物性基礎】

6. M. Tanaka, D. Teramoto : Modulation of homogeneous shear turbulence laden with finite-size particles : Journal of Turbulence, Vol.16, No.10, pp.979 - 1010, 2015

### 【4402 気象・海洋物理・陸水学】

7. Kazushi Takemura, Ishioka Keiichi, Shochi Shige : Development of a non-hydrostatic atmospheric model using the Chimera grid method for a steep terrain : Atmospheric Science Letters, Vol.114, No.November 2015, pp.109 - 114, 2015
8. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法により地形表現を行う気象モデルへの雲微物理過程の実装 : 第 17 回非静力学モデルに関するワークショップ予稿集, 2015
9. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法を用いた非静力学モデルへの雲微物理過程の導入 : 日本気象学会 2015 年度秋季大会予稿集, 2015
10. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法を用いた非静力学モデルによる山岳波の数値実験 : 日本気象学会 2015 年度春季大会予稿集, 2015

### 【4801 機能材料・デバイス】

11. Genta Kawaguchi, Mitsuhiko Maesato, Tokutaro Komatsu, Hiroshi Kitagawa, Tatsuro Imakubo, Andhika Kiswandhi, David Graf, James S Brooks : Unconventional Magnetic and Resistive Hysteresis in an Iodine - Bonded Molecular Conductor : Angewandte Chemie International Edition, Vol.54, No.35, pp.10169 - 10172, 2015
12. Jared M Taylor, Tokutaro Komatsu, Shun Dekura, Kazuya Otsubo, Masaki Takata, Hiroshi Kitagawa : The Role of a Three Dimensionally Ordered Defect Sub-lattice on the Acidity of a Sulfonated Metal-Organic Framework : JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, Vol.137,

- No.35, pp.11498 - 11506, 2015
13. Tokutaro Komatsu, Jared M. Taylor, Hiroshi Kitagawa : Design of a Conducting Metal-Organic Framework: Orbital-Level Matching in MIL-140A Derivatives : INORGANIC CHEMISTRY, Vol.55, No.2, pp.546 - 548, 2015
  14. Genta Kawaguchi, Mitsuhiko Maesato, Tokutaro Komatsu, Tatsuro Imakubo, Hiroshi Kitagawa : Interplay between spin-density wave and 3 d local moments with random exchange in a molecular conductor : Physical Review B, Vol.93, No.7, pp.075124 - , 2016
- 【4905 工学基礎】
15. Shugo Yasuda, Ryoichi Yamamoto : Synchronized Molecular-Dynamics simulation for the thermal lubrication of a polymeric liquid between parallel plates : Computers and Fluids, Vol.124, pp.185 - 189, 2016
- 【5001 機械材料・材料力学】
16. 永田恵輔, 西川雅章, 北條正樹 : シェル要素による CFRP 膜面の展開挙動の解析 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  17. 橋爪良輔, 新玉重貴, 北條正樹, 西川雅章 : ボイドを含む CFRP 構造要素の強度解析手法の検討 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  18. 福造晃, 西川雅章, 北條正樹 : 不連続 CFRTP の塑性特性の実験と解析 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  19. 古賀貢史, 橋爪良輔, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : X線 CT によるボイドの定量化と複合材剛性・強度への影響の解析 : 日本機械学会関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表会講演論文集, 2015
  20. Masaaki Nishikawa, Ichiro Taketa, Kei Ueda, Masaki Hojo : Micromechanical Finite Element Analysis on Compressive Strength of Carbon Fiber-Reinforced Plastics : Proc. of 14th Japanese-European Symposium on Composite Materials, 2015
  21. 永田恵輔, 西川雅章, 北條正樹 : モード合成法を用いた CFRP 薄膜の変形挙動の解析 : 第 40 回複合材料シンポジウム 講演論文集, 2015
  22. 福造晃, 西川雅章, 北條正樹 : 不連続 CFRTP の塑性力学特性の微視的解析 : 第 1 回材料 WEEK 若手学生研究発表会 講演論文集, 2015
  23. 古賀貢史, 橋爪良輔, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : CFRP 内部のボイドの観察と幾何形状を考慮した力学特性の有限要素解析 : 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス 講演論文集, 2015
  24. Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto : Tension-compression asymmetry in uniaxial deformation of a magnesium bicrystal with [-1100] symmetric tilt grain boundary : Computational Materials Science, Vol.118, pp.124 - 132, 2016
- 【5004 流体工学】
25. Pillai Abhishek, Tomoaki Kitano, Ryoichi Kurose, Satoru Komori : Direct Numerical Simulation of Combustion Noise in Open Hydrogen Diffusion Jet Flames : In Proc. of International Gas Turbine Congress 2015 (IGTC2015), 2015
- 【5401 金属物性】
26. T. Ichitsubo, S. Okamoto, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara : Toward "rocking-chair type" Mg-Li dual-salt batteries : J. Mater. Chem. A, Vol.3, pp.10188 - 10194, 2015
  27. S. Okamoto, T. Ichitsubo, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, K. Shimokawa, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara : Intercalation and push-out process with spinel-to-rocksalt transition on Mg insertion into spinel oxides in magnesium batteries : Advanced Science, Vol.2, pp.1500072-1 - 1500072-9, 2015
  28. Y. Hinuma, Y. Kumagai, F. Oba, I. Tanaka : Categorization of surface polarity from a crystallographic approach : Computational Materials Science, Vol.113, pp.221 - 230, 2016
  29. K. T. Butler, Y. Kumagai, F. Oba, A. Walsh : Screening procedure for structurally and electronically matched contact layers for high-performance solar cells: hybrid

- perovskites : J. Mater. Chem. C, Vol.4, pp.1149 - 1158, 2016
30. A. A. Belik, W. Yi, Y. Kumagai, Y. Katsuya, M. Tanaka, F. Oba : LiNbO<sub>3</sub>-type oxide (Tl<sub>1-x</sub>Sc<sub>x</sub>)ScO<sub>3</sub>: High-pressure synthesis, crystal structure, and electronic properties : Inorganic Chemistry, Vol.55, pp.1940 - 1945, 2016
- 【5501 化工物性・移動操作・単位操作】
31. 岡本幸也, 高木洋平, 岡野泰則 : 高シュミット混合溶液における相分離ドメインと乱流渦構造の相関 : 日本流体力学会年会 2015 講演論文集, 2015
32. N. Adkar, T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, S. Dost : Proc. of the joint conference of ISPS-6 and ITTW2015 : Numerical Simulation of the Effect of the Free Surface Shape on Marangoni Convection in a Ring-Shaped Liquid Film with Low Prandtl Number, Vol.FI-ST(A)-P07, 2015
33. N. Adkar, T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano : Numerical investigation of the effect of the liquid film volume on thermocapillary flow in a thin circular liquid film ~ various Prandtl number fluids ~ : 化学工学会第47回秋季大会, Vol.P122, 2015
34. T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, S. Dost : Numerical investigation of oscillatory thermocapillary flows under zero gravity in a circular liquid film with concave free surfaces : Phys. Fluids, Vol.28, No.3, pp.032106 - , 2016
- 【5603 地球・資源システム工学】
35. Yumi Katasho, Yunfeng Liang, Sumihiko Murata, Yasuhiro Fukunaka, Toshifumi Matsuoka, Satoru Takahashi : Mechanisms for Enhanced Hydrophobicity by Atomic-Scale Roughness : Scientific Reports, Vol.5, No.13790, pp.1 - 12, 2015
36. Asuka Fukutome, Haruo Kawamoto, Shiro Saka : Gas-Phase Reactions of Glyceraldehyde and 1,3-Dihydroxyacetone as Models for Levoglucosan Conversion during Biomass Gasification : ChemSusChem, 2016
- 【5803 生物物理学】
37. Hiraku Oshima, Tomohiko Hayashi, Masahiro Kinoshita : Essential Roles of Water in Actin-Myosin Binding : Biophysical Journal, Vol.110, No.Issue 3, Supplement 1, pp.300a - , 2016
- 【6801 化学系薬学】
38. Masato Saito, Nobuya Tsuji, Yusuke Kobayashi, Yoshiji Takemoto : Direct Dehydroxylative Coupling Reaction of Alcohols with Organosilanes through Si-X Bond Activation by Halogen Bonding : Org. Lett., Vol.17, No.12, pp.3000 - 3003, 2015
39. Yusuke Kobayashi, Ryuta Kuramoto, Yoshiji Takemoto : Catalytic asymmetric formal synthesis of beraprost : Beilstein J. Org. Chem, Vol.11, pp.2654 - 2660, 2015