

センター利用による研究成果

—平成 29 年度計算機利用結果報告書から—

- 【1501 生活科学一般】
1. A. Sharma, W. M. C. Sameera, M. Jin, Masayoshi, L. Adak, C. Chiemi, T. Iwamoto, M. Kato, M. Nakamura, K. Morokuma : DFT and AFIR Study on the Mechanism and the Origin of Enantioselectivity in Iron-Catalyzed Cross-Coupling Reactions : J. Am. Chem. Soc., Vol.139, No.45, pp.16117 - 16125, 2017
 2. M. Isegawa, W. M. C. Sameera, A. K. Sharma, T. Kitano, M. Kato, S. Kobayashi, K. Morokuma : Copper-catalyzed Enantioselective Boron Conjugate Addition: DFT and AFIR Study on Different Selectivities of Cu(I) and Cu(II) Catalysts : ACS Catal., Vol.7, No.8, pp.5370 - 5380, 2017
- 【2202 自然災害科学】
3. Asano, K., T. Iwata, H. Sekiguchi, K. Somei., K. Miyakoshi, S. Aoi, and T. Kunugi : Surface wave group velocity in the Osaka sedimentary basin, Japan, estimated using ambient noise cross-correlation functions : Earth, Planets and Space, Vol.69, No.108, pp.1 - 20, 2017
- 【2301 基礎ゲノム科学】
4. Bowman J.L, Kohchi T., Yamato K.T, et al. : Insights into Land Plant Evolution Garnered from the *Marchantia polymorpha* Genome : Cell, Vol.171, No.2, pp.287 - 304, 2017
- 【4104 基礎解析学】
5. 岸本 展, 斉木 吉隆, 中井 拳吾, 米田 剛: 粘性項を変形した流体方程式に対する大域解の有界性と Energy Cascade の考察: 第 14 回数学総合若手研究集会 : 数学の交叉点, Vol.173, pp.403 - 406, 2018
- 【4304 数理物理・物性基礎】
6. Mitsuru Tanaka : Effect of gravity on the development of homogeneous shear turbulence laden with finite-size particles : Journal of Turbulence, Vol.18, No.12, pp.1144 - 1179, 2017
- 【4403 超高層物理学】
7. Kazem Ardaneh, Dongsheng Cai, and Ken-Ichi Nishikawa : COLLISIONLESS ELECTRON SHOCKS IN RELATIVISTIC UNMAGNETIZED JET-AMBIENT INTERACTIONS: NON-THERMAL ELECTRON INJECTION BY DOUBLE LAYER : The Astrophysical Journal, Vol.827, pp.124 - 15pp, 2016
- 【4801 機能材料・デバイス】
8. Tomohiro Higashino, Shimpei Nimura, Kenichi Sugiura, Yuma Kurumisawa, Yukihiro Tsuji, Hiroshi Imahori : Photovoltaic Properties and Long-Term Durability of Porphyrin-Sensitized Solar Cells with Silicon-Based Anchoring Groups : ACS Omega, Vol.2, pp.6958 - 6967, 2017
- 【5001 機械材料・材料力学】
9. Masaaki Nishikawa, Keisuke Nagata, Yuta Naito, Masaki Hojo, Naoki Matsuda : Development of dynamic deployment simulation of thin composite layer for shape morphing structure : Proc. of 21st International Conference on Composite Materials (ICCM-21), 2017
 10. 西川 雅章, 高橋奈緒子, 西正人, 王俊翔, 平島 禎, 北條正樹, 松田直樹: 炭素繊維織物の賦形時の変形に関する実験と有限要素モデリング: 2017 年度 JCOM 若手シンポジウム 講演論文集, 2017
 11. 西川 雅章: 局所繊維配向を有する複合材料の損傷発生に関する Peridynamics 解析法の検討: 日本機械学会 第 30 回計算力学講演会 講演論文集, 2017

12. M. Nishikawa, N. Matsuda, M. Hojo : Modeling of Multiple-Type, Multiple-Site Damage in Composite Laminates Using Peridynamics Theory: Proc. American Society for Composites (ASC)?32nd Annual Technical Conference, 2017
13. 西川雅章, 高橋奈緒子, 松田直樹, 北條正樹: 炭素繊維織物の賦形プロセス後の繊維配向と欠陥発生に関する検討: 第55回飛行機シンポジウム 講演論文集, 2017
- 【5004 流体工学】
14. Yong Hu, Ryoichi Kurose : Nonpremixed and premixed flamelets LES of partially premixed spray flames using a two-phase transport equation of progress variable : Combustion and Flame, Vol.188, pp.227 - 242, 2018
15. Rudra N. Roy, Masaya Muto, Ryoichi Kurose : Direct numerical simulation of ignition of syngas (H₂/CO) mixtures with temperature and composition stratifications relevant to HCCI conditions : International Journal of Hydrogen Energy, Vol.42, pp.26152 - 26161, 2017
- 【5202 構造工学・地震工学・維持管理工学】
16. 山下将一, 富山 潤, 阿部和久, 佐伯竜彦, 紅露一寛: 数値シミュレーションと逆解析によるコンクリート橋の付着塩分量推定: 土木学会第72回年次学術講演会, No.V-434, pp.867 - 868, 2017
17. 山下将一, 富山 潤, 阿部和久, 佐伯竜彦, 紅露一寛: 風向を考慮した3次元数値解析によるコンクリート橋の付着塩分量推定: コンクリート構造物の補修, 補強, アップグレード論文報告集, Vol.17, pp.609 - 614, 2017
18. 野口恭平, 金城佑紀, 秦聡一郎, 白土博通, 八木知己, 中西克佳: 任意地点橋梁における部位別の飛来塩分量予測: 土木学会論文集 A1 (構造・地震工学), Vol.73, No.2, pp.364 - 375, 2017
19. Kyohei Noguchi, Hiromichi Shirato, Tomomi Yagi : Numerical evaluation of sea salt amounts deposited on bridge girders : Journal of Bridge Engineering, Vol.22, No.7, 2017
- 【5204 水工水理学】
20. 鳥生大祐, 牛島省 : 異なる物性値を有する圧縮性流体と固体の熱連成問題に対する多相場解析手法: 土木学会第20回応用力学シンポジウム 講演概要集, Vol., No.C000053, pp., 2017
21. 榊原幸星, 鳥生大祐, 牛島省 : 流体と温度依存性のある超弾性体との連成計算: 日本流体力学会 年会 2017, 2017
22. S. Ushijima, D. Toriu, K. Aoki, H. Itada and D. Yagyu : Numerical prediction for many floating debris transported in city model due to tsunami-induced flows : VII International Conference on Computational Methods in Marine Engineering (MARINE2017), 2017
23. H. Yanagi, S. Ikeda, D. Toriu and S. Ushijima : Computations of Density Currents by Numerical Models with and without Boussinesq Approximations as Well as by Compressible-Fluid Model : Compsafe2017, No.S16110, 2017
24. S. Ushijima and D. Toriu : Parallel computation method for momentum and heat interactions between fluids and complicated-shaped solids : ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer (CHT-17), No.CHT-17-254, 2017
25. 鳥生大祐, 牛島省 : 混合体モデルに基づく圧縮性流体と移動する固体の熱連成計算手法: 土木学会論文集 A2 (応用力学), Vol.73, No.2, pp.I_143 - I_152, 2017
- 【5401 金属物性】
26. L. A. Burton, Y. Kumagai, A. Walsh, and F. Oba : DFT investigation into the underperformance of sulfide materials in photovoltaic applications : Journal of Materials Chemistry A, Vol.5, No.19, pp.9132 - 9140, 2017
27. Y. Hinuma, H. Hayashi, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba : Comparison of approximations in density functional theory calculations: Energetics and structure of binary oxides : Physical Review B, Vol.96, No.9, pp.094102-1 - 094102-24, 2017
28. Y. Kumagai, K. Harada, H. Akamatsu, K. Matsuzaki, and F. Oba : Carrier-induced band-gap variation and point defects in Zn₃N₂ from first principles: Physical Review Applied,

- Vol.8, No.1, pp.014015-1 - 014015-12, 2017
29. Y. Kumagai, N. Tsunoda, and F. Oba : Point defects and p-type doping in ScN from first principles : *Physical Review Applied*, Vol.9, No.3, pp.034019-1 - 034019-10, 2018
- 【5403 複合材料・物性】
30. S. Iwata : Molecular dynamics simulation of effect of glycerol monostearate on amorphous polyethylene in the presence of water : *Journal of Molecular Modeling*, Vol.23, No., pp.115(1) - 115(7), 2017
31. S. Iwata : Interaction between 1-phenylethanone, 2-phenyl-2-propanol, and isopropenylbenzene with water molecules: A computational study : *Computational and Theoretical Chemistry*, Vol.1117, pp.188 - 195, 2017
32. S. Iwata, H. Uehara, T. Takada : Computational study on acetophenone in amorphous polyethylene : *Journal of Molecular Modeling*, Vol.23, pp.274(1) - 274(9), 2017
- 【5501 化工物性・移動操作・単位操作】
33. (阪大院基工) 矢野雅貴・山本卓也・岡野泰則・(藤森工業) 都倉知浩・(産総研) 金森敏幸・(阪大院工) 紀ノ岡正博 : 懸濁培養最適化のための数値流体解析・離散要素法連成シミュレーション : 化学工学会 第 82 年会, 2017
34. M. Yano, T. Yamamoto, Y. Okano, T. Kanamori, and M. Kino-oka : Numerical study of fluid dynamics in suspension culture of iPS cell : *Asean Journal of Chemical Engineering*, Vol.17, No.1, pp.73 - 81, 2017
35. 堀内鷹之・山本卓也・岡野泰則・宇治原徹 : 誘導加熱 TSSG 法による SiC 結晶成長時の面内成長速度分布に及ぼす各種因子の影響に関する数値解析 : 化学工学会第 49 回秋季大会要旨集, No.DA118, 2017
36. 堀内鷹之・WANG Lei・山本卓也・宇治原徹・岡野泰則 : 数値解析を用いた誘導加熱 TSSG 法による SiC 結晶成長製造装置の最適化条件の探索 : *JCCG-46 予稿集*, No.28p-P32, P33 - P33, 2017
37. 堀内鷹之・WANG Lei・山本卓也・宇治原徹・岡野泰則 : 誘導加熱 TSSG 法による SiC 結晶作製時の各種成長条件の影響に関する数値解析 : 化学工学会金沢大会 2017 予稿集, No.D106, 2017
38. 堀内鷹之・WANG Lei・関本敦・岡野泰則・宇治原徹 : SiC 溶液成長におけるるつぼサイズ及びるつぼ回転の影響に関する数値解析 : 化学工学会第 83 回年会要旨集, No.PD305, 2018
- 【6801 化学系薬学】
39. Taryn, M.; Murata, A.; Kobayashi, Y.; Takemoto, Y. : Enantioselective Synthesis of anti- β -Hydroxy- α -amino Esters via an Organocatalyzed Decarboxylative Aldol Reaction : *Synlett*, Vol.28, No.11, pp.1295 - 1299, 2017
40. Saito, M.; Kobayashi, Y.; Tsuzuki, S.; Takemoto, Y. : Electrophilic Activation of Iodonium Ylides by Halogen-Bond-Donor Catalysis for Cross-Enolate Coupling : *Angew. Chem. Int. Ed.*, Vol.56, No., pp.7653 - 7657, 2017
41. Kobayashi, Y.; Masakado, S.; Takemoto, Y. : Photoactivated N-Acyliminoiodinanes Applied to Amination: an ortho-Methoxymethyl Group Stabilizes Reactive Precursors : *Angew. Chem. Int. Ed.*, Vol.57, pp.693 - 697, 2017