

サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー

サブ課題代表者: 杉野 修

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有り の場合○を記 入）
1	Assessing the accuracy of the van der Waal density functionals for rare gas and molecular systems	M. Callsen and I. Hamada	Phys. Rev. B 91, 195103	2015年5月	国外	○
2	A single-atom-thick TiO <sub>2</sub> nanomesh on an insulating oxide	T. Ohsawa, M. Saito, I. Hamada, R. Shimizu, K. Iwaya, S. Shiraki, Z. Wang, Y. Ikuhara, T. Hitosugi	ACS Nano 9, 8766-8772	2015年8月	国外	○
3	Recent progress in predicting structural and electronic properties of organic solids with the van der Waals density functional	S. Yanagisawa, K. Okumura, T. Inaoka, and I. Hamada	J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 204, 159-167	2015年10月	国外	○
4	Tuning the van der Waals Interaction of Graphene with Molecules via Doping	F. Huttman, A. J. Martínez-Galera, V. Caciuc, N. Atodiresei, S. Schumacher, S. Standop, I. Hamada, T. O. Wehling, S. Blügel, T. Michely	Phys. Rev. Lett. 115, 236101	2015年12月	国外	○
5	Adsorption of reaction of H <sub>2</sub> S on Cu(110) with scanning tunneling microscope	A. Shiotari, S. Hatta, H. Okuyama, T. Aruga, and I. Hamada	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 4541-4546	2016年1月	国外	○
6	First-Principles Study of Ion Diffusion in Perovskite Solar Cell Sensitizers	J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, Y. Tateyama	J. Am Chem. Soc., 137, 10048-10051	2015年8月	国外	○
7	Surface Properties of CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> for Perovskite Solar Cell	J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, Y. Tateyama	Acc. Chem. Res., 49, 554-556	2016年2月	国外	○
8	Corrosion Prevention Mechanism of Aluminum Metal in Superconcentrated Electrolytes	Yuki Yamada, Ching Hua Chiang, Keitaro Sodeyama, Jianhui Wang, Yoshitaka Tateyama, Atsuo Yamada	ChemElectroChem 2, 1687-1694	2015年7月	国外	○
9	A method to calculate redox potentials relative to the normal hydrogen electrode in nonaqueous solution by using density functional theory-based	Ryota Jono, Yoshitaka Tateyama, Koichi Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 27103	2015年9月	国外	○
10	Near-Shore Aggregation Mechanism of Electrolyte Decomposition Products to Explain Solid Electrolyte Interphase Formation	Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Zdenek Futera, Yoshitaka Tateyama, Yukihiko Okuno	J. Electrochem. Soc. 162, A2670-A2678	2015年10月	国外	○

11	Investigating crystalline-polarity-dependent electronic structures of GaN by hard x-ray photoemission and ab-initio calculations	Takeo Ohsawa, Shigenori Ueda, Motohiro Suzuki, Yoshitaka Tateyama, Jesse R. Williams, Naoki Ohashi	Appl. Phys. Lett. 107, 171604	2015年10月	国外	○
12	Conservation of the pure adiabatic state in Ehrenfest dynamics of the photoisomerization of molecules	Yoshiyuki Miyamoto, Yoshitaka Tateyama, Norihisa Oyama, Takahisa Ohno	Sci. Rep. 5, 18220	2015年12月	国外	○
13	First-principles study on the cosensitization effects of Ru and squaraine dyes on a TiO <sub>2</sub> surface	Yusuke Ootani, Keitaro Sodeyama, Liyuan Han, Yoshitaka Tateyama	Surf. Sci. 649, 66-71	2016年2月	国外	○
14	Sodium-Ion Intercalation Mechanism in MXene Nanosheets	Satoshi Kajiyama, Lucie Szabova, Keitaro Sodeyama, Hiroki Iinuma, Ryohei Morita, Kazuma Gotoh, Yoshitaka Tateyama, Masashi Okubo, Atsuo Yamada	ACS Nano 10, 3334-3341	2016年2月	国外	○
15	Life of superoxide in aprotic Li-O <sub>2</sub> battery electrolytes: simulated solvent and counter-ion effects	Johan Scheers, D. Lidberg, Keitaro Sodeyama, Zdenek Futera, Yoshitaka Tateyama	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 9961-9968	2016年2月	国外	○
16	A Study on Electrolytic Corrosion of Boron-Doped Diamond Electrodes when Decomposing Organic Compounds	Takeishi Kashiwada, Takeshi Watanabe, Yusuke Ootani, Yoshitaka Tateyama, Yasuaki Einaga	ACS Appl. Mater. Interfaces	2016年3月	国外	○
17	Decomposition of the fluoroethylene carbonate additive and the glue effect of lithium fluoride products for the solid electrolyte interphase: an ab initio study	Yukihiro Okuno, Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Yoshitaka Tateyama	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 8643-8653	2016年3月	国外	○
18	Improving DIIS convergence for metallic systems using Gaussian basis set	David Sulzer, Satoru Iuchi, Koji Yasuda	Chemical Physics Letters 635 (2015) pp. 201-204	2015年7月	国外	○
19	Molecular dynamics study of the structure of anionic SDS, cationic DTAC, zwitterionic DDAO, and nonionic C12E8 spherical micelles in solution	Noriyuki Yoshii, Kazushi Fujimoto, Susumu Okazaki	J. Mol. Liq.	2015年12月	国外	○
20	Molecular dynamics study of the formation mechanisms of ionic SDS and nonionic C12E8 micelles and n-dodecane droplets	Shinji Kawada, Mika Komori, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki	Chem. Phys. Lett.	2016年1月	国外	○
21	A molecular dynamics study of the breathing and deforming modes of the spherical ionic SDS and nonionic C12E8 micelles	Lin Wang, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, and Susumu Okazaki	J. Chem. Phys.	2016年1月	国外	○
22	Molecular dynamics study of lipid bilayers modeling the plasma membranes of mouse hepatocytes and hepatomas	Y Andoh, N Aoki, S Okazaki	J. Chem. Phys.	2016年2月	国外	○