

# 2011年度スーパーコンピューティングシステム研究成果報告書

2011年4月～2012年3月

## I. 研究内容概要

1. 第一原理計算および遺伝的アルゴリズムによる分子デバイス用ナノスケール材料の設計  
東北大学金属材料研究所 水関博志
2. feramコードによる強誘電体の分子動力学シミュレーション  
東北大学金属材料研究所 西松 毅, 青柳健大  
アイオワ州立大学 Scott P. Beckman
3. パーコレーションモデルを用いた電導薄膜の材料設計(4)  
東北大学未来科学技術共同研究センター 志田和人  
東北大学金属材料研究所 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
4. 全電子混合基底法プログラムTOMBOによる新規水素貯蔵材料の開発  
東北大学金属材料研究所 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸  
デルフト工科大 M. H. F. Sluiter  
横浜国立大学工学部 大野かおる, 東北大学金属材料研究所
5. AN ATOMISTIC LEVEL DESCRIPTION OF PROPERTIES OF COMPLEX MATERIALS  
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
6. High-pressure Phase Transitions of Hydrogen Cyanide and Cyanogen Molecules  
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Yoshiyuki Kawazoe
7. Theoretical Study on the Hydrogen Adsorption Properties of Functionalized Carboranes  
IMR, Tohoku University Natarajan S Venkataramanan, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe

8. Effect of the Transition Metal (Fe, Cr, and Co) Doping on the Opto-Electronic Properties of Indium tin Oxide: *Ab-initio* Study  
IMR, Tohoku University M. N. Tripathi, R. Sahara, K. Shida, H. Mizuseki,  
Y. Kawazoe
9. New Opened Conductive Channels in Zigzag Graphene Nanoribbons  
Dept. of Physics, Fudan University, Shanghai, China D.D. Wu, F. Jiang,  
G. Yin, H. Chen  
IMR, Tohoku University Y. Y. Liang, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
10. The Band Engendering of Silicene Zigzag Nano Ribbon  
IMR, Tohoku University Yunye Liang, Hiroshi Mizuseki,  
Yoshiyuki Kawazoe
11. Electrical Conductivity of Langatate Crystal with Point Defects Advanced  
Materials Design  
IMR, Tohoku University Chan-Yeup Chung, Hiroshi Mizuseki,  
Yoshiyuki Kawazoe  
Citizen Holdings, Co. LTD. Ritsuko Yaokawa
12. Effects of Alkali Adatoms on CO and H<sub>2</sub>S Adsorptions on the Fe(100) Surface: A  
Density Functional Theory Study  
IMR, Tohoku University M. Haris Mahyuddin, Rodion V. Belosludov,  
Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
13. First Principles Investigation of the Core/Shell Nano-Precipitate in FeCuMnNiAl  
Alloy  
Advanced Institute for Materials Research, WPI, Tohoku University  
L.J. Kang, Y.R. Wen, M. W. Chen  
IMR, Tohoku University H. Mizuseki, Y. Kawazoe
14. "Magnetism and Geometric Structure of GNDs with Interior, Edges and Apexes  
Modified by the Addition of H Atoms. ", "Change in Magnetism Accompanying  
the Growth of Intrinsically Magnetically Protrusions on a GND Parent that has a  
Single Spin Polarized Ground State", "GNDs Modified by Substitution of Interior

Carbon Atoms by Boron or Nitrogen"

IMR, Tohoku University Michael R. Philpott, Yoshiyuki Kawazoe  
Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, Chemistry Department,  
University of California, Berkeley, California, USA Michael R. Philpott  
Computational Research Division, Lawrence Berkeley National Laboratory,  
One Cyclotron Way, Berkeley, California, USA Prabhat

15. THERMODYNAMICS AND HYDROGEN STORAGE ABILITY OF MIXED  
HYDROGEN-ETHANE CLATHRATE HYDRATE

Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
V. R. Belosludov, O.S. Subbotin  
IMR, Tohoku University V. R. Belosludov, O.S. Subbotin, R. V.  
Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe

16. 精密第一原理計算と実験との協同によるナノ物質研究

横浜国立大学工学部 大野かおる  
東京大学物性研究所 野口良史  
横浜国立大学大学院工学研究院 RAEBIGER, Hannes  
横浜国立大学大学院工学府 野田祐輔, 鳥海優人, 藤田武士, 福富修平

17. THEORETICAL ASPECTS OF GAS STORAGE IN CLATHRATE HYDRATES:  
LATTICE DYNAMICS CALCULATIONS

Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
O.S. Subbotin, V. R. Belosludov  
IMR, Tohoku University O.S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V.  
Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe

18. Mono-Layered Growth of Platinum Cluster on Silicon(111) -  $7 \times 7$  Surface

Cluster Research Laboratory, Toyota Technological Institute, Futamata,  
Ichikawa, Chiba, Japan : in East Tokyo Laboratory, Genesis Research  
Institute, Inc., Futamata, Ichikawa, Chiba, Japan Hisato Yasumatsu  
CSIR Central Electrochemical Research Institute, Karaikudi, Tamil Nadu,  
India Palanichamy Murugan  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

19. Atomic and Electronic Structure of Pd<sub>40</sub>Ni<sub>40</sub>P<sub>20</sub> Bulk Metallic Glass from *Ab Initio*

## Simulations

Dr. Vijay Kumar Foundation, Haryana, India Vijay Kumar  
Advanced Institute for Materials Research, WPI, Tohoku University  
T. Fujita, M. W. Chen, A. Inoue  
Sendai National College of Technology, Natori, Japan K. Konno  
IMR, Tohoku University M. Matsuura, Y. Kawazoe

20. Manifestation of Interface Induced Effects in Ag/Si (111) Epitaxial Hetero-Junction  
Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Kolkata, INDIA  
A.H.M. Abdul Wasey, G. P. Das  
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
21. Adsorption of Oxygen-Containing Functional Groups on Supported Graphene Through Point-Contact  
Center for Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing, China Qian Wang  
Physics Department, Virginia Commonwealth University, Richmond, VA, USA Qian Wang, D.X. Ye, P. Jena  
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
22. A Multi-Relaxation-Time Lattice Boltzmann Front Tracking Method for Two-Phase Flow with Surface Tension  
Department of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing, PR China  
Haiqiong Xie, Zhong Zeng, Liangqi Zhang, Gongyou Liang  
IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
23. First Principles Study on Carbon Nanostructures  
School of Physics, Madurai Kamaraj University, Madurai, Tamil Nadu, India  
V. J. Surya, K. Iyakutti  
Department of Physics, Noorul Islam University, Kumaracoil, Tamilnadu, India K. Iyakutti  
IMR, Tohoku University H. Mizuseki, Y. Kawazoe
24. Investigation on Properties of Functionalized Carbon Nanostructures and Their

## Applications

School of Physics, Madurai Kamaraj University, Madurai, Tamil Nadu, India

K. Iyakutti, M. Rajarajeswari, V. J. Surya

Department of Physics, Noorul Islam University, Kumaracoil, Tamilnadu,

India K. Iyakutti,

IMR, Tohoku University H. Mizuseki, Y. Kawazoe

### 25. Transition Metal-Derived Oxygen Reduction Reaction in Boron Nitride Nanosheets

Korea Institute of Science and Technology(KIST), Seoul, Republic of Korea

Gyubong Kim, Kwang-Ryeol Lee

IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

### 26. Electron Transport Characteristics of Organic Molecule Encapsulated Carbon Nanotubes

LG Chem. Ltd / Research Park Sang Uck Lee

IMR, Tohoku University Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,

Yoshiyuki Kawazoe

### 27. Characterization of Zero-point Vibration in One-Component Crystals

IMR, Tohoku University Yong Yang, Yoshiyuki Kawazoe

### 28. Orthorhombic Carbon Allotrope of Compressed Graphite

Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China

Jian-Tao Wang

Department of Physics, University of Nevada, Las Vegas, Nevada, USA

Changfeng Chen

IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

### 29. Improved Stability and Catalytic Properties of a Gold Cage Anchored on Graphane

School of Physics, University of Jinan, Jinan, China G. Chen

IMR, Tohoku University G. Chen, H. Mizuseki, Y. Kawazoe

### 30. Ni 原子のフント第一, 第二経験則の解釈の研究

東北大学理学研究科 小山田隆行

東北大学金属材料研究所 川添良幸, 安原 洋

31. First-Principles Study of Intrinsic Defect Properties in Hexagonal BN Monolayer  
IMR, Tohoku University Vei Wang  
Department of Applied Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China  
Ning Ma  
IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
32. LiGe Nanoclusters: a Promising Candidate Material for Hydrogen Storage  
North Carolina State University, Raleigh, NC, USA Prithwish Kumar Nandi  
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki,  
Yoshiyuki Kawazoe
33. 高温超伝導体固有ジョセフソン接合におけるTHz発振  
東北大学金属材料研究所 小山富男
34. First Principles Investigation on Hf-H System  
International Research Center for Nuclear Materials Science,  
IMR, Tohoku University Hao Wang, Kenji Konashi
35. 原子力関連材料の計算科学的研究  
東北大学金属材料研究所 小無健司, 王 昊, 三宅真紀  
伊藤忠テクノソリューションズ株式会社(CTC) 源 聡  
独立行政法人 日本原子力研究開発機構 加藤正人
36. Phase-Field 法を用いた耐熱および医療用コバルト合金中の界面偏析の研究  
東北大学金属材料研究所 小泉雄一郎, 鈴木 将, 李 云平,  
黒須信吾, 松本洋明, 千葉晶彦
37. アクチノイド錯体の構造, 物性, 熱力学諸量に関する量子化学計算  
東北大学金属材料研究所 山村朝雄, 大田 卓, 稲 克彦,  
佐藤伊佐務, 四竈樹男  
東北大学多元物質科学研究所 桐島 陽  
京都大学原子炉実験所 上原章寛
38. 数値シミュレーションを援用した高効率フッ化物単結晶成長技術の構築  
東北大学大学院工学研究科 塚田隆夫

39. 含浸法により作製したバルク状Li-N-H系錯体水素化物の熱移動解析  
東北大学金属材料研究所 千星 聡, 森山聡子, 毛受正治, 高木成幸,  
折茂慎一  
東北大学工学研究科 池庄司民夫
40. 電池材料の第一原理シミュレーション  
東北大学工学研究科 池庄司民夫  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. 微量元素で置換されたセメントクリンカー化合物の結晶構造と水和反応性  
秋田工業高等専門学校 桜田良治  
Indian Institute of Science, Bangalore, India Abhishek Kumar Singh  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
42. Effect of the Edge Type and Strain on the Structural, Electronic and Magnetic Properties of the BNRs  
Indian Institute of Science, Bangalore, India Abhishek Kumar Singh,  
Swastibrata Bhattacharyya  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
43. 炭素ナノ材料の第一原理計算  
金沢大学理工研究域 斎藤峯雄  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
44. 銅クラスターイオン上での吸着酸素分子の解離経路探索  
豊田工業大学 市橋正彦  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
45. 熱電材料等の材料特性の計算機シミュレーションによる予測  
山口大学大学院理工学研究科 嶋村修二, 仙田康浩  
山口大学メディア基盤センター 赤井光治
46. 計算機を用いた熱電変換材料の高性能化指針の探索  
山口大学メディア基盤センター 赤井光治  
山口大学大学院理工学研究科 仙田康浩, 嶋村修二

47. THz波増幅用結晶最適化のための第一原理シミュレーション解析  
大阪大学レーザーエネルギー学研究中心 センター 猿倉信彦
48. 分子動力学計算を用いた籠状シリセスキオキサン熱的性質の研究  
株式会社 積水インテグレートドリサーチ 阿部 弘  
東京工業大学総合理工学研究科 富田育義, 巾崎順子  
東北大学金属材料研究所 野手竜之介, 水関博志, 川添良幸
49. Study on the Relationship Between Curie Temperature and Effective Exchange  
Parameter in Neodymium-Iron Compounds  
Research and Technology Center Asia Pacific, District Japan,  
Bosch Corporation Takashi Shigematsu  
Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China  
Jian-Tao Wang  
Corporate Sector Research and Advanced Engineering, Robert Bosch GmbH  
Alberto Martinez-Limia, Lothar Kunz, Thomas Eckl  
IMR, Tohoku University Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki,  
Yoshiyuki Kawazoe
50. 軟X線集光鏡の変形解析と可変鏡への応用  
東北大学多元物質科学研究所 豊田光紀, 対馬康平, 柳原美廣
51. Pressure-Dependent Mechanical Stability of Simple Cubic Carbon  
Advanced Institute for Materials Research, WPI, Tohoku University  
Bin Wen, Tadafumi Adschiri  
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials,  
Tohoku University Seiichi Takami  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
52.  $\text{Au}_{65}\text{Cu}_{10.5}\text{Si}_{17}\text{Ag}_{7.5}$  金属ガラスの原子構造  
東北大学WPI-AIMR 藤田武志, 陳 明偉  
東北大学金属材料研究所 松浦 真, W. Zhang  
仙台高等専門学校 今野一弥
53. DEVELOPING HIGH-FIDELITY INTERATOMIC POTENTIALS FROM  
FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

School of Physics, Astronomy and Computational Sciences,  
George Mason University, Fairfax, VA, USA H.W. Sheng  
Advanced Institute for Materials Research, WPI, Tohoku University  
T. Fujita, M. W. Chen

54. Tuning Magnetism of Graphene Nanoribbons with Topological Defects  
Department of Advanced Materials and Nanotechnology,  
Peking University, Beijing, China Jian Zhou, Qiang Sun  
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
55. 新規医療用プローブ材料創製及び有効性計測と大規模計算との協同  
独立行政法人 物質・材料研究機構 根城 均  
東北大学工学研究科 池庄司民夫  
東北大学金属材料研究所 水関博志  
東京工業大学環境エネルギー機構 尾上 順  
滋賀県立大学工学部 奥 健夫  
東京工業大学理工学研究科 高嶋明人
56. Computational Study of the Fe-Si System from First-Principles Calculations  
Fracture and Reliability Research Institute Graduate School of Engineering  
Tohoku University Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Ken Suzuki,  
Hideo Miura
57. グラフェン・CNTにおける電子励起状態経路Stone-Wales転位—ピレンモデル  
を用いた非断熱反応経路探索—  
東北大学大学院理学研究科 化学専攻 山崎 馨, 新津直幸,  
中村公亮, 菅野 学, 河野裕彦
58. 有限要素法による GaN 自立基板作製における熱応力の解析  
東北大学学際科学国際高等研究センター 岡野真也, 八百隆文
59. Theoretical Study of Light Elements (B, C, N, and O) Dissolved in  $\alpha$  Iron by  
Firstprinciples Calculation  
Department of Materials Science Graduate School of Engineering  
Osaka Prefecture University Souissi Maaouia, Numakura Hiroshi

60. A Density Functional Study of Atomic Oxygen and Water Molecule Adsorption on Nickel and Chromium-Doped Nickel(111),(100),and(110) Surfaces  
Frontier Research Initiative(FRI), New Industry Creation Hatchery Center,  
Tohoku University Nishith Kumar Das, Tetsuo Shoji
61. ミクロ-マクロ有限要素解析を用いた塑性加工問題の金属材料組織予測  
独立行政法人 物質・材料研究機構・元素戦略材料センター  
渡邊育夢
62. ナノ構造超電導体の渦糸ダイナミクス  
大阪府立大学工学研究科 加藤 勝  
秋田大学教育文化学部 林 正彦  
東北大学教養教育院 海老澤丕道  
東北大学金属材料研究所 小山富男  
独立行政法人 物質・材料研究機構・超伝導物性ユニット 平田和人  
東京大学工学系研究科物理 工学専攻 為ヶ井強  
大阪府立大学工業高等専門学校 佐藤 修  
大阪府立大学地域連携部門 川又修一  
大阪府立大学工学研究科 石田武和, 野口 悟, 丹羽祐平,  
藤林デイビッド
63. 半導体結晶中の欠陥構の原子レベル解析  
関西学院大理工学部 西谷滋人, 正木佳宏, 谷口 僚
64. 放射光、中性子実験に向けた強磁場パルスマグネットの開発  
東北大学金属材料研究所 鳴海康雄
65. Adsorption of Ammonia Over CNT- a Mechanistic Study using *Ab initio* Study.  
Material Science, Accelrys, Kasumigaseki, Tokyo, Japan Abhijit Chatterjee  
IMR, Tohoku University R. Venkataraman, Yoshiyuki Kawazoe
66. 銅酸化物における複合励起状態の解明  
独立行政法人 日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター  
森 道康
67. 太陽電池向け結晶生産炉の炉内温度分布解析

東北大学金属材料研究所, 株式会社シリコンプラス 松島 悟  
東北大学金属材料研究所 宇佐美徳隆

68. STUDY ON CO<sub>2</sub> ADSORPTION MECHANISM ON LI<sub>2</sub>ZRO<sub>3</sub> SURFACE  
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials,  
Tohoku University N. Tokuda, S. Ueda, R. Inoue, T. Ariyama  
IMR, Tohoku University R. Belosludov, Y. Kawazoe
69. Characteristics of New Approach for Aluminum Hydrogen Storage  
National Institute for Materials Science Masahiko Katagiri
70. 全電子混合基底法第一原理計算プログラムTOMBOの開発と原子・電子レベルでの理論新材料設計研究  
東北大学金属材料研究所 川添良幸

## II. 原著論文

### <2011年>

1. Prediction and Analysis of the Cathode Catalyst Layer Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cells Using Artificial Neural Network and Statistical Methods  
J. Power Sources, **196**[8] (2011) pp.3750-3756  
N. Khajeh-Hosseini-Dalasm, S. Ahadian, K. Fushinobu, K. Okazaki and Y. Kawazoe
2. First-Principles Simulation of Cyanogen Under High Pressure: Formation of Paracyanogen and an Insulating Carbon Nitride Solid  
Phys. Rev. B, **83**[13] (2011) pp.1341111-1341118  
Mohammad Khazaei, Madhvendra Nath Tripathi and Yoshiyuki Kawazoe
3. Fast-Ionic Conductivity of Li<sup>+</sup> in LiBH<sub>4</sub>  
Phys. Rev. B, **83**[14] (2011) pp.1443011-1443015  
Tamio Ikeshoji, Eiji Tsuchida, Tetsuya Morishita, Kazutaka Ikeda, Motoaki Matsuo, Yoshiyuki Kawazoe and Shin-ichi Orimo

4. Carbon-Doped K<sub>4</sub> Nitrogen: A Novel High Energy Density Material  
Chem. Phys. Lett., **506**[4-6] (2011) pp.175-178  
Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri
5. Gate-Controlled Current and Inelastic Electron Tunneling Spectrum of Benzene: A Self-Consistent Study  
J. Chem. Phys., **134**[14] (2011) pp.14411301-14411310  
Y. Y. Liang, H. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
6. *In situ* Observation of Polycrystalline Silicon Thin Films Grown Using Aluminum-Doped Zinc Oxide on Glass Substrate by the Aluminum-Induced Crystallization  
Jpn. J. Appl. Phys., **50**[4] (2011) pp.04DP021-04DP025  
Mina Jung, Atsushi Okada, Takanobu Saito, Takashi Suemasu, Chan-Yeup Chung, Yoshiyuki Kawazoe and Noritaka Usami
7. Structural and Electronic Properties of Neutral and Charged Ca<sub>8</sub>C<sub>12</sub> Metal Carbides  
Chem. Phys. Lett., **507**[4-6] (2011) pp.260-264  
Gang Chen, Qi Peng and Yoshiyuki Kawazoe
8. Electronic Structures and Spectra of Symmetric Meso-Substituted Porphyrin: DFT and TDDFT-PCM Investigations  
Int. J. Quantum Chem., **111**[10] (2011) pp.2340-2351  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ambigapathy Suvitha, Hitoshi Nejo, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
9. Pressure-Dependent Mechanical Stability of Simple Cubic Carbon  
Physica B, **406**[13] (2011) pp.2654-2657  
Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri
10. First Principles Investigation on Carbon Nanostructures Functionalized with Borane: An Analysis on their Hydrogen Storage Capacity  
Physica E, **43**[8] (2011) pp.1528-1534  
V. J. Surya, K. Iyakutti, V. Prasanna Venkatesh, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

11. Long-Range Topological Order in Metallic Glass  
Science, **332**[6036] (2011) pp.1404-1406  
Qiaoshi Zeng, Hongwei Sheng, Yang Ding, Lin Wang, Wenge Yang,  
Jian-Zhong Jiang, Wendy L. Mao and Ho-Kwang Mao
12. Coinage Metal (4, 4) Nanotubes, Simulated by First-Principles Calculations  
J. Chem. Phys., **134**[24] (2011) pp.2445041-2445045  
Wei Fa, Jian Zhou, Jinming Dong and Y. Kawazoe
13. Mechanism for Direct Conversion of Graphite to Diamond  
Phys. Rev. B, **84**[1] (2011) pp.0121021-0121025  
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe
14. Interaction of Valine and Valine Radicals with Single-Walled Carbon Nanotube (5, 0)  
Chem. Phys. Lett., **511**[4-6] (2011) pp.299-303  
M. Rajarajeswari, K. Iyakutti and Y. Kawazoe
15. Conductivity Percolation on a Cubic Lattice with Core-Shell Particles  
Mater. Trans., **52**[6] (2011) pp.1259-1262  
Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, MN Tripathi, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
16. Single Walled Carbon Nanotubes Functionalized with Hydrides as Potential Hydrogen Storage Media: A Survey of Intermolecular Interactions  
Phys. Status Solidi B, **248**[9] (2011) pp.2147-2158  
V. J. Surya, K. Iyakutti, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
17. First Principles Study on Desorption of Chemisorbed Hydrogen Atoms from Single-Walled Carbon Nanotubes under External Electric Field  
Int. J. Hydrogen Energy, **36**[21] (2011) pp.13645-13656  
V. J. Surya, K. Iyakutti, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
18. Hydrogenation-Chain-Opened Conductive Channels in Zigzag Graphene Nanoribbons  
J. Appl. Phys., **110**[3] (2011) pp.0337121-0337126

D. D. Wu, F. Jiang, G. Yin, H. Chen, Y. Y. Liang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

19. Structural Basis for Supercooled Liquid Fragility Established by Synchrotron-Radiation Method and Computer Simulation  
J. Appl. Phys., **110**[4] (2011) pp.0435191-0435196  
D. V. Louzguine-Luzgin, R. Belosludov, A. R. Yavari, K. Georgarakis, G. Vaughan, Y. Kawazoe, T. Egami and A. Inoue
  
20. Magnetism and Bonding in Graphene Nanodots with H Modified Interior, Edge, and Apex  
J. Chem. Phys., **135**[8] (2011) pp.08470701-08470711  
Michael R. Philpott, Prabhat and Yoshiyuki Kawazoe
  
21. Atomistic Configurational Effects on Piezoelectric Properties of  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  and a New Piezoelectric Crystal Design  
Acta Mater., **59**[16] (2011) pp.6473-6479  
Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
22. Interaction Between Alanine and Single-Walled Carbon Nanotube: A Density Functional Theory Study  
AIP Conf. Proc., **1349** (2011) pp.293-294  
M. Rajarajeswari, K. Iyakutti and Y. Kawazoe
  
23. Computation of Interaction Potential of Adsorbates on Zigzag SWCNTs — Application to Functionalization and Hydrogen Storage  
Int. J. Nanosci., **10**[3] (2011) pp.391-396  
I. Lakshmi, D. Silambarasan, V. J. Surya, M. Rajarajeswari, K. Iyakutti, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
24. Considering the Effect of Different Arrangements of Pentagons on Density of States of Capped Carbon Nanotubes  
Physica B, **406**[20] (2011) pp.3885-3890  
Somayeh Khazaei, Mohammad Khazaei, Hosein Cheraghchi, Vahid Daadmehr and Yoshiyuki Kawazoe

25. First-Principles Study of the H<sub>2</sub> Splitting Processes on Pure and Transition-Metal-Doped Al (111) Surfaces  
Int. J. Hydrogen Energy, **36**[20] (2011) pp.12742-12752  
Qi Peng, Gang Chen, Lijing Kang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
26. An Effective Computational Approach to the Parametric Study of the Cathode Catalyst Layer of PEM Fuel Cells  
Mater. Trans., **52**[10] (2011) pp.1954-1959  
S. Ahadian, N. Khajeh-Hosseini-Dalasm, K. Fushinobu, K. Okazaki and Y. Kawazoe
27. Improved Stability and Catalytic Properties of Au<sub>16</sub> Cluster Supported on Graphane  
J. Phys. Chem. C, **115**[41] (2011) pp.20168-20174  
G. Chen, S. J. Li, Y. Su, V. Wang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
28. High-Pressure Phases of Hydrogen Cyanide: Formation of Hydrogenated Carbon Nitride Polymers and Layers and their Electronic Properties  
J. Phys. Condens. Matter, **23**[40] (2011) pp.40540301-40540312  
Mohammad Khazaei, Yunye Liang, Mohammad Saeed Bahramy, Fabio Pichierri, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
29. Atomic and Electronic Structure of Pd<sub>40</sub>Ni<sub>40</sub>P<sub>20</sub> Bulk Metallic Glass from *Ab Initio* Simulations  
Phys. Rev. B, **84**[13] (2011) pp.1342041-1342046  
Vijay Kumar, T. Fujita, K. Konno, M. Matsuura, M. W. Chen, A. Inoue and Y. Kawazoe
30. Adsorption Mechanism of Single Guanine and Thymine on Single-Walled Carbon Nanotubes  
J. Mol. Model., **17**[11] (2011) pp.2773-2780  
Muthusivarajan Rajarajeswari, Kombiah Iyakutti and Yoshiyuki Kawazoe
31. Controlling 3D Percolation Threshold of Conductor-Insulator Composites by Changing the Granular Size of Conductors  
Mater. Trans., **52**[12] (2011) pp.2216-2219

Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

32. Effect of Rotating Magnetic Field on Three-Dimensional Instabilities of Thermocapillary Convection under Microgravity  
AIP Conf. Proc., **1376** (2011) pp.114-116  
L. P. Yao, Z. Zeng, J. Q. Chen, C. B. Chen, L. Li, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
33. Many-Electron States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond and Spin Density Calculations  
Phys. Rev. B, **84**[16] (2011) pp.1652121-1652126  
Ahmad Ranjbar, Mohsen Babamoradi, Mehdi Heidari Saani, Mohammad Ali Vesaghi, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
34. Effect of Lattice Relaxation on Spin Density of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond and Oscillator Strength Calculations  
Eur. Phys. J. B, **84**[1] (2011) pp.1-9  
M. Babamoradi, M. Heidari Saani, A. Ranjbar, M. A. Vesaghi and Y. Kawazoe
35. Effects of Alkali Adatoms on CO and H<sub>2</sub>S Adsorptions on the Fe(100) Surface: A Density Functional Theory Study  
J. Phys. Chem. C, **115**[48] (2011) pp.23893-23901  
M. Haris Mahyuddin, Rodion V. Belosludov, Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
36. Correlation Between Entanglement and Spin Density in Nitrogen-Vacancy Center of Diamond  
Eur. Phys. J. D, **65**[3] (2011) pp.597-603  
M. Babamoradi, M. Heidari Saani, A. Ranjbar, M. A. Vesaghi and Y. Kawazoe
37. A First-Principles Study on Water Flow Through Single-Walled Carbon Nanotubes Using Artificial Neural Network Method  
J. Nanosci. Nanotechnol., **11**[11] (2011) pp.10227-10233  
Samad Ahadian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

38. A Density Functional Study of Atomic Oxygen and Water Molecule Adsorption on Ni(1 1 1) and Chromium-Substituted Ni(1 1 1) Surfaces  
Appl. Surf. Sci., **258**[1] (2011) pp.442-447  
Nishith Kumar Das and Tetsuo Shoji
39. Highly Optimized Embedded-Atom-Method Potentials for Fourteen Fcc Metals  
Phys. Rev. B, **83**[13] (2011) pp.13411801-13411820  
H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita and M. W. Chen
40. Cyclic Hydrogenation and Dehydrogenation Property of LiNH<sub>2</sub> Impregnated into Ni Foam  
Mater. Trans., JIM, **52**[4] (2011) pp.623-626  
Masaharu Menjo, Yoshihiro Hyodo, Satoko Moriyama, Hai-Wen Li,  
Motoaki Matsuo, Satoshi Semboshi and Shin-ichi Orimo
41. Multiple Spin State Analysis of Magnetic Nano Graphene  
J. Magn. Soc. Jpn., **35**[4] (2011) pp.360-365  
Norio Ota, Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
42. Multiple Spin State Analysis in Radical Carbon Edge and Oxygen Edge Graphene-like Molecule  
J. Magn. Soc. Jpn., **35**[5] (2011) pp.414-419  
Norio Ota, Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe

< 2012年 >

1. Simulation of Ripples in Single Layer Graphene Sheets and Study of their Vibrational and Elastic Properties  
Comput. Mater. Sci., **51**[1] (2012) pp.96-102  
K. Iyakutti, V. J. Surya, K. Emelda and Y. Kawazoe
2. GW Calculations on La<sub>3</sub>Ta<sub>0.5</sub>Ga<sub>5.5</sub>O<sub>14</sub> with Oxygen Vacancies at Non-Equivalent Sites  
Comput. Mater. Sci., **54** (2012) pp.43-47  
Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and

Yoshiyuki Kawazoe

3. First Principles Calculations of Oxygen Vacancy in Langatate Crystal  
Solid State Ionics, **206**[5] (2012) pp.1-6  
Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
4. Orthorhombic Carbon Allotrope of Compressed Graphite: *Ab initio* Calculations  
Phys. Rev. B, **85**[3] (2012) pp.0334101-0334104  
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe
5. Noncovalent and Covalent Functionalization of a (5, 0)Single-walled carbon  
Nanotube with Alanine and Alanine Radicals  
J. Mol. Model., **18**[2] (2012) pp.771-781  
Muthusivarajan Rajarajeswari, Kombiah Iyakutti and Yoshiyuki Kawazoe
6. Polymerization of Cyanoacetylene Under Pressure: Formation of Carbon Nitride  
Polymers and Bulk Structures  
Phys. Rev. B, **85**[5] (2012) pp.0541011-0541019  
Mohammad Khazaei, Yunye Liang, Natarajan S. Venkataramanan and  
Yoshiyuki Kawazoe
7. Adsorption of Oxygen-Containing Functional Groups on Free and Supported  
Graphene Using Point Contact  
Phys. Rev. B, **85**[8] (2012) pp.08540401-08540411  
Qian Wang, D. X. Ye, Y. Kawazoe and P. Jena
8. Wigner Crystallization of Quadratically Dispersing Electrons in Graphene  
Int. J. Quantum Chem., **112**[6] (2012) pp.1725-1736  
C Kombiah Iyakutti, Velappa Jayaraman Surya,  
Ratnavelu Rajeswarapalanichamy and Yoshiyuki Kawazoe
9. Graphene Nanodots with Intrinsically Magnetic Protrusions  
J. Chem. Phys., **136**[6] (2012) pp.0647061-0647069  
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

10. New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by the Method of Euclidean Designs  
Mater. Trans., **53**[3] (2012) pp.459-462  
Makoto Tagami, Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani
11. A Fourier-Legendre Spectral Element Method in Polar Coordinates  
J. Comput. Phys., **231**[2] (2012) pp.666-675  
Zhouhua Qiu, Zhong Zeng, Huan Mei, Liang Li, Liping Yao and Liangqi Zhang
12. The Improved Space-Time Conservation Element and Solution Element Scheme for Two-Dimensional Dam-Break Flow Simulation  
Int. J. Numer. Methods Fluids, **68**[5] (2012) pp.605-624  
Yongxiang Zhang, Zhong Zeng and Jingqiu Chen
13. Tantalum Vacancy Effects on Electrical Conductivity of  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  and Ba-based *P321* Crystals  
Key Eng. Mater., **508** (2012) pp.325-330  
Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
14. Magnetism of Edge Modified Nano-graphene  
J. Magn. Soc. Jpn., **36**[1-2] (2012) pp.36-41  
Norio Ota, Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
15. Magnetism of Two-Dimensional Triangular Nanoflake-Based Kagome Lattices  
New J. Phys., **14** (2012) pp.03304301-03304311  
Xiaowei Li, Jian Zhou, Qian Wang, Xiaoshuang Chen, Y. Kawazoe and P. Jena

### III. 国際会議発表論文

< 2011年 >

1. First-Principles Calculations on Hydrogen Storage Capacity

2011 MRS Spring Meeting

San Francisco, CA, USA (2011.4.25-29) No.UU12.9 (Oral)

H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara and Y. Kawazoe

2. Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials Using All - electron Mixed - basis Program TOMBO

2011 MRS Spring Meeting

San Francisco, CA, USA (2011.4.25-29) No.N3.16 (Poster)

R. Sahara, H. Mizuseki, M. Sluiter, K. Ohno and Y. Kawazoe

3. Novel Hydrogen Storage Materials: An Atomic Scale Computational Approach

2011 MRS Spring Meeting

San Francisco, CA, USA (2011.4.25-29) No.N3.25 (Poster)

H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, G. Chen, M. Khazaei and Y. Kawazoe

4. Atomistic Modeling on Defects in Multicrystalline Silicon

2011 MRS Spring Meeting

San Francisco, CA, USA (2011.4.25-29) No.RR5.19 (Poster)

H. Mizuseki, A. Suvitha, R. Sahara and Y. Kawazoe

5. Theoretical Modeling of Phase Diagram of Clathrate Hydrates toward Hydrogen Storage Applications

Nanotech 2011 – TechConnect WORLD Conference & Expo 2011

Boston, MA ,USA(2011.6.13-16) Vol. 1, Chapter 8, pp.710-713 (Oral)

R. V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov and Y. Kawazoe

6. *Ab initio* Calculations of Oxygen Vacancy in Langatate Piezoelectric Crystal

Baltic Boat Conference - Novel Materials by Smart Approaches - ,

Baltic sea Sweden (2011.6.13-18)

Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

7. Prediction of Nanostructured Materials with Quality Assurance

NANO2011 – V Krajowa Konferencja Nanotechnologii –

Politechnika Gdańska (2011.7.3-7) p.23, No.WP02 (Plenary)  
Yoshiyuki Kawazoe

8. PREDICTION OF STRUCTURE, COMPOSITION AND PHASE BEHAVIOR OF HELIUM HYDRATES

7th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2011),  
Edinburgh, Scotland, UK (2011.7.17-21) No.445 (Poster)  
Vladimir Belosludov, Oleg Subbotin, Yulia Bozhko, Rodion Belosludov,  
Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Vasily Fomin

9. STRUCTURE TRANSFORMATIONS SI – SII IN HYDROGEN – METHANE AND HYDROGEN – ETHANE CLATHRATE HYDRATES

7th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2011),  
Edinburgh, Scotland, UK (2011.7.17-21) No.530 (Poster)  
O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov,  
H. Mizuseki and Y. Kawazoe

10. THEORETICAL ASPECTS OF HYDROGEN STORAGE IN CLATHRATE HYDRATES: LATTICE DYNAMICS AND FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

7th International Conference on Gas Hydrates (ICGH 2011),  
Edinburgh, Scotland, UK (2011.7.17-21) No.559 (Poster)  
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, O. S. Subbotin and  
V. R. Belosludov

11. EFFECT OF DOPING POSITION OF Sr ATOM ON CRYSTAL STABILITY OF BETA-FORM BELITE

36th Conference on Our World in Concrete and Structures,  
Singapore (2011.8.14-16) pp.365-372  
R. Sakurada, A. K. Singh and Y. Kawazoe

12. Stone-Wales Rearrangement in Pyrene *via* the S<sub>1</sub> State

The Seventh Congress of the International Society for  
Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII),  
Waseda, Tokyo, Japan (2011.9.2-8) pp.166, No.6A3-3C (Poster)  
Kaoru Yamazaki, Naoyuki Niitsu and Hirohiko Kono

13. Tohoku Mixed Basis Orbitals *Ab Initio* Program (TOMBO)  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) pp.Info30-Info32, Short Course II  
R. Sahara, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
14. First Principles Investigation on Potential Hydrogen Storage Materials  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.7, No.3B.2 (Invited)  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Hydrogen Storage in Mixed Clathrate Hydrate: Molecular Level Description of Thermodynamics Properties  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) pp.7-8, No.3B.3 (Invited)  
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
16. Design of Metal-Organic Framework Materials for Selective Gas and Drug Separation: The Role of Host-Guest Interaction  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.25, No.11A.4 (Oral)  
Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
17. Development of All-Electron Mixed-Basis *Ab Initio* Program TOMBO and Application for Developing Hydrogen Storage Materials  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.26, No.11B.2 (Oral)  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

18. Thermodynamic Stability of Ozone Hydrates  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.31, No.12B.5 (Oral)  
O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
19. Molecular Model of Mixed Argon—Hydrogen Clathrate Hydrate sII  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.34, No.P008 (Poster)  
R. K. Zhdanov, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
20. Prediction of Structure, Composition and Phase Diagram of Neon Hydrates  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.35, No.P010 (Poster)  
Yulia Bozhkoa, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
21. Calcium-Decorated Graphene for Hydrogen Storage: A van der Waals Density Functional Study  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.38, No.P020 (Poster)  
Wei Wang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
22. Oxygen Vacancy Effects on Single Crystalline  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{11}$  Piezoelectric Materials  
The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9) p.45, No.P044 (Poster)  
Chan-Yeup Chung, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
23. Many-Electron States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond and Evidence of

### Dynamic Jahn-Teller Effect

The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)

Singapore (2011.9.6-9) p.53, No.P068 (Poster)

Ahmad Ranjbara, Mohsen Babamoradi, Mehdi Heidari Saani,  
Mohammad Ali Vesaghi, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

### 24. Effects of Alkali Adatom on CO Adsorption on Fe(100) Surface: A Density Functional Theory Study

The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)

Singapore (2011.9.6-9) p.57, No.P081 (Poster)

M. Haris Mahyuddin, Rodion V. Belosludov, Mohammad Khazaei,  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

### 25. Single Molecule Conductance of Perfluorinated Bipyridyl Ethynes: Mechanism of Molecule-Electrode Surface Binding

The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)

Singapore (2011.9.6-9) p.58, No.P085 (Poster)

L. J. Kang, Y. Y. Liang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

### 26. The Transport Properties of Silicene

The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)

Singapore (2011.9.6-9) p.60, No.P090 (Poster)

Y. Y. Liang, H. Mizuseki and K. Kawazoe

### 27. Origin of Magnetism — Failure of Slater's Perturbation Theory —

XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics

Kanazawa, Japan (2011.9.11-17) p.37 (Oral)

Yoshiyuki Kawazoe

### 28. Computer Simulation to Design Efficient and Clean Hydrogen Storage Materials Low Carbon Earth Summit 2011

Dalian, China (2011.10.19-26) p.646

Yoshiyuki Kawazoe

29. Formation and Hardness of Perovskite-Type Solid Solution  $\text{La}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Rh}_3\text{B}$   
17th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials  
(ISBB 2011)  
Istanbul, Turkiye (2011.11.3-5) p.187, No.56-O (Oral)  
Toetsu Shishido, Kunio Yubuta, Akiko Nomura, Takao Mori,  
Akira Yoshikawa, Kunio Kudou, Shigeru Okada and Yoshiyuki Kawazoe
  
30. Structural Stability of  $\text{AlH}_3$  as Hydrogen Storage Material  
the 2<sup>nd</sup> ISNPEDADM – 2011  
Noumea, New Caledonia (2011.11.14-19) Poster  
Masahiko Katagiri, Seiichi Kato and Kuniko Urashima
  
31. Capping Ligand Protection of Core/Shell Quantum Dots: Theoretical Study  
2011 MRS Fall Meeting  
Boston, MA, USA (2011.11.28-12.2) No.GG1.5 (Oral)  
Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki  
Kawazoe
  
32. First-Principles Study of Structural Stability, Magnetism, and Hyperfine Coupling  
in Hydrogen Clusters Adsorbed on Graphene  
2011 MRS Fall Meeting  
Boston, MA, USA (2011.11.28-12.2) No.AA15.24 (Poster)  
Ahmad Ranjbardizaj, Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei,  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
33. First-Principles Calculation on Transport Properties of Nanoscale Molecular Wires  
2011 MRS Fall Meeting  
Boston, MA, USA (2011.11.28-12.2) No.BB5.30 (Poster)  
Hiroshi Mizuseki, Sang Uck Lee, Rodion Belosludov and Yoshiyuki  
Kawazoe
  
34. Electronic and Transport Properties of Atomic Nanowires Deposited on Silicon  
Surface

2011 MRS Fall Meeting

Boston, MA, USA (2011.11.28-12.2) No.BB15.2 (Poster)

Rodion Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki, Kazushi Miki and  
Yoshiyuki Kawazoe

35. Atomistic Modeling on Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon for  
Photovoltaic Cell

2011 MRS Fall Meeting

Boston, MA, USA (2011.11.28-12.2) No.CC10.21 (Poster)

Hiroshi Mizuseki, Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara and  
Yoshiyuki Kawazoe

36. Cyclic Hydrogenation and Dehydrogenation Property of Impregnated Lithium  
Amide

International Symposium of Materials Integration

In Conjunction with ASPT2011 & KINKEN-WAKATE 2011

Miyagi, Japan (2011.12.1-2) pp.34

Masaharu Menjo, Satoko Moriyama, Motoaki Matsuo, Satoshi Semboshi,  
Shin-ichi Orimo and Yoshiyuki Kawazoe

37. Origin of Magnetism –After 80 Years, Slater’s Perturbation Theory Proved to be  
Wrong–

International Symposium of Materials Integration

In Conjunction with ASPT2011 & KINKEN-WAKATE 2011

Miyagi, Japan (2011.12.1-2) pp.97, No.C-11 (Oral)

Yoshiyuki Kawazoe

38. Local Configurational Effects on Piezoelectric Properties of  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  and a  
New Material Design

International Symposium of Materials Integration

In Conjunction with ASPT2011 & KINKEN-WAKATE 2011

Miyagi, Japan (2011.12.1-2) pp.161, No.P-49 (Poster)

Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe

39. Investigation of Convection Control Under the Non-Uniform RMF in a Liquid

## Bridge

1st International Conference on Advances in Computational Modeling and Simulation 2011, ACMS2011, Kunming, China (2011.12.14-16)

Liping Yao, Zhong Zeng, Jingqiu Chen, Liang Li, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

40. Effect of Strain on Adsorption of Hydrogen on Graphene: A First-Principles Study  
56th DAE Solid State Symposium,  
Chennai, India (2011.12.19-23)  
V. J. Surya, K. Iyakutti, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

41. First-Principles Study of Exohedral and Substitutional Chemical Functionalization of Graphene  
56th DAE Solid State Symposium,  
Chennai, India (2011.12.19-23)  
K. Iyakutti, V. J. Surya and Y. Kawazoe

## < 2012年 >

1. Chymera Magnetic States of Graphene Nanodots  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-2  
Michael R Philpott, Prabhat and Yoshiyuki Kawazoe
2. Investigation of Effect of Unequal Effective Mass Fermions in Graphene  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-3  
K. Iyakutti, V.J. Surya and Y Kawazoe
3. Mechanism for Direct Conversion of Graphite to Diamond  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-4

Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe

4. All-electron Mixed Basis Approach for Accurate First Principles Calculations  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-8  
Kaoru Ohno, Yoshifumi Noguchi, Riichi Kuwahara, Marcel F. Sluiter, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
5. Charge Transfer to Organic Semiconductors on Au Electrodes Modified by Self-assembled Monolayers : Comparison Between Experiment and Theory  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-11  
Katsumi Tanigaki, Yan Wang, Thangal Kanagasekaran, Shang Hui, Kazuhide Shimotani, Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
6. EQUATION OF STATE AND EFFECT OF SELF-PRESERVATION OF HYDROGEN HYDRATE  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Inv-16  
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
7. New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8-12 Atoms Found by the Method of Euclidean Designs  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-9  
Makoto Tagami, Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe and Motoko Kotani
8. Structural Stability of Beta-Form Belite Doped by Sr Atom  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-15

Ryoji Sakurada, Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe

9. Enhanced H<sub>2</sub> Splitting by Surface Step on Transition-metal-doped Al(111) Surfaces

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-18

G. Chen, Y. Su, S.J. Li, P. Zhao, Y. Zhang, H.Y. Liu, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

10. Convection Control by Rotating Magnetic field in Floating Zone Model

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-21

Zhong Zeng, Li Ping Yao, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

11. Effect of the Nature of Dopant on the Optoelectronic Properties of Indium tin Oxide

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-23

Madhvendra N Tripathi, K. Shida, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

12. First-Principles Study of Oxygen and Water Adsorption on Perfect and Defect Indium Oxide and Tin-Doped Indium Oxide (111) Surfaces

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-24

T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura

13. A Consequence of Detecting the Near-field Emission from an Individual Single Molecule

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.Ora-26

H. Nejo, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

14. Empirical Potential Investigation on Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-1  
Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Micromagnetic Modelling of Granular Materials  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-2  
Hiroshi Mizuseki, Kazuhito Shida, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
  
16. Complexation Ability of Macrocyclic Cucurbituril Host with Pt - Anticancer Guests  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-3  
N.S. Venkataramanan, H. Nejo, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
17. Study on the Relationship Between Curie Temperature and Effective Exchange Parameter in Iron and its Alloys  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-6  
Takashi Shigematsu , Jian-Tao Wang, Alberto Martinez-Limia, Lothar Kunz, Thomas Eckl, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
18. First-principles Study of Intrinsic Defect Properties in Hexagonal BN Layer  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-7  
W. Wang, N. Ma, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
19. The Transport Properties of Silicene on ZnS Film  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-13  
Y. Y. Liang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

20. Heating-up and Cooling-down Molecular-dynamics Simulations of 90-degree Domain Structures in  $\text{PbTiO}_3$

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-15

Takeshi Nishimatsu, Kenta Aoyagi, Takanori Kiguchi, Toyohiko J. Konno, Yoshiyuki Kawazoe, Anil Kumar and Umesh V. Waghmare

21. Argon + Hydrogen Mixed Clathrate Hydrate: Molecular Modeling

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-16

Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

22. Thermodynamic Stability of Mixed Ozone-containing Hydrates.

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-18

O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

23. First Principles Calculations on Intrinsic Point Defects and Related Properties of Langatate Piezoelectric Crystal

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-19

Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

24. First-principles Study of Frequency-dependent Polarizabilities and Van der Waals Dispersion Coefficients for Atoms (clusters) within the All-electron Mixed-basis Approach

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-21  
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

25. Development of All-electron Mixed-basis *Ab initio* Program TOMBO and Application for Hydrogen Storage Materials  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-27  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
26. First Principle Investigation of the Core/shell Nano-precipitate in FeCuMnNiAl Alloy  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-29  
L. J. Kang, Y. R. Wen, M. W. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. High-pressure Phase Transitions of Hydrogen Cyanide and Cyanogen Molecules  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-30  
Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
28. Many-electron States of Nitrogen-vacancy Centers in Diamond and Spin Density Calculations  
The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-31  
Ahmad Ranjbar, Mohsen Babamoradi, Mehdi Heidari Saani, Mohammad Ali Vesaghi, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
29. Prediction and Analysis of the Cathode Catalyst Layer Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cells using Artificial Neural Network and Statistical

## Methods

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-33

S. Ahadian, N. Khajeh-Hosseini-Dalasm, K. Fushinobu,  
K. Okazaki and Y. Kawazoe

### 30. THEORETICAL STUDY OF ATOMIC NANOWIRES DEPOSITED ON SILICON SURFACEA

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-37

R. V. Belosludov, A. A. Farajian, H. Mizuseki, K. Miki and Y. Kawazoe

### 31. Controlling Percolation by Modulating the Granular Size of Insulating Materials

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-38

K. Shida, R. Sahara, M. N. Tripathi, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

### 32. Theoretical Approach to the Nature of Light Elements Dissolved in Iron

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-39

Souissi Maaouia, Chen Ying and Numakura Hiroshi

### 33. Adsorption Behavior of CO<sub>2</sub> on Li<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub> Surface from First-principles Calculations

The Sixth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)

Miyagi, Japan (2012.2.10-12) No.PS-52

N.Tokuda, S. Ueda, R. Belosludov, Y. Kawazoe and T. Ariyama

### 34. Hydrogenation of Aluminum by Anodic Coating for AlH<sub>3</sub> Hydrogen Storage Material

2nd International Conference on Future Environment and Energy (ICFEE2012),

Singapore (2012.2.26-28) pp66-69, No.F028  
Masahiko Katagiri, Kuniko Urashima and Seiichi Kato

35. CO Oxidation on Copper Oxide Cluster Ions

2012 APS March Meeting

Boston, Massachusetts, USA (2012.2.29-3.2) No.Q34.00002 (Oral)

M. Ichihashi, S. Hirabayashi and Y. Kawazoe

36. Phase-Field Simulation of Segregation to Stacking Fault and Twin Boundaries in  
Co-based Alloys

TMS2012 141<sup>ST</sup> Annual Meeting & Exhibition,

Orlando, FL, USA (2012.3.11-15) (Oral)

Yuichiro Koizumi, Sho Suzuki, Takuma Ohtomo, Shingo Kurosu,

Yungping Li, Hiroaki Matsumoto and Akihiko Chiba

37. First Principles Investigation on Hf-H System

1<sup>st</sup> Asian Nuclear Fuel Conference,

Osaka, Japan (2012.3.22-23) P92-93, No.PS-13

Hao Wang and Kenji Konashi

## IV. 紀要

### <2011年>

1. 精密第一原理計算と実験との協同によるナノ物質研究

平成22年度 東北大学金属材料研究所

研究部共同研究報告 (2011.6) p.170

大野かおる, 鳥海優人

2. 熱電材料等の材料特性の計算機シミュレーションによる予測

平成22年度 東北大学金属材料研究所

研究部共同研究報告 (2011.6) p.171

嶋村修二, 赤井光治, 仙田康浩, 松浦 満

3. ナノ磁性の第一原理計算

平成22年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2011.6) p.172  
斎藤峯雄, 川添良幸

4. 研究室紹介

研友 第68号(2010~2011) pp. 31-32  
川添良幸

<2012年>

1. 第一原理シミュレーション計算による新物質設計

グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
GCOEプログラム活動成果報告書2011, pp.61-63  
川添良幸

2. Many-Electron States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond and Spin Density Calculation

グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
GCOEプログラム活動成果報告書2011, pp.110-111  
RANJBARDIZAJ Ahmad

3. Exploration of Novel Hydrogen Storage Materials Through First Principles Simulation

グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
GCOEプログラム活動成果報告書2011 pp.146  
Qi Peng

4. Accurate Band Gap Prediction of Lead-Free Piezoelectric and Oxide Materials With and Without Oxygen Vacancy

グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
GCOEプログラム活動成果報告書2011 pp.147  
Chan-Yeup Chung

5. Li Diffusion Mechanism in LiBH<sub>4</sub>  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.18  
彭 琪
  
6. *Ab initio* Calculations of Oxygen Vacancy in Langatate Piezoelectric Crystal  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.22  
鄭 燦燁
  
7. Single Molecule Conductance of Perfluorinated Bipyridyl Ethynes: Mechanism of Molecule-Electrode Surface Binding  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.36  
康 利静
  
8. Proton Transfer Reactions and Dynamics in Phosphoric Acid Materials  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.74  
Charoensak Lao-ngam
  
9. Local Atomistic Configuration Effects on Piezoelectric Properties of La<sub>3</sub>Ta<sub>0.5</sub>Ga<sub>5.5</sub>O<sub>14</sub> and a New Piezoelectric Crystal Design  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点  
平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.157  
CHUNG Chanyeup
  
10. First-Principles Study of the H<sub>2</sub> Splitting Process on the Al (111) Surface  
グローバルCOEプログラム 東北大学  
材料インテグレーション国際教育研究拠点

平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.158

Peng Qi

11. Chemical Engineering of Adamantane by Lithium Functionalization: A First-Principles Density Functional Theory Study

グローバルCOEプログラム 東北大学

材料インテグレーション国際教育研究拠点

平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.159

Ahmad Ranjbardizaj

12. Many-Electron States of Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond and Evidence of Dynamic Jahn-Teller Effect

グローバルCOEプログラム 東北大学

材料インテグレーション国際教育研究拠点

平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.160

Ahmad Ranjbardizaj

13. Oxygen Vacancy Effects on Single Crystalline  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  Piezoelectric Materials

グローバルCOEプログラム 東北大学

材料インテグレーション国際教育研究拠点

平成23年度外国・国内派遣支援成果報告書 pp.161

鄭 燦燁

## V. 予稿集

### <2011年>

1. 全電子混合基底法プログラムTOMBOによる新規水素貯蔵材料の開発  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.95, No.S4・3  
佐原亮二, 水関博志, M. H. F. Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
2. 第一原理計算によるアルカリ金属をドーピングした新規水素貯蔵材料探索と評価

日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.95, No.S4・4  
水関博志, N. S. Venkataramanan, 陳 剛, M. Khazaei, 佐原亮二,  
川添良幸

3. Inelastic Electron Tunneling Spectrum of Benzene: A Self-Consistent Study  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.97, No.S4・8  
梁 云燁, 水関博志, 川添良幸, Hao Chen
4. Structural, Dynamic and Thermodynamic Properties of Ni During the Cooling Process  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.98, No.S4・10  
R. V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸, D. V. Louzguine-Luzgin, 井上明久
5. Surface Hydrogenation Process of Al(111) Surface – a First Principles Approach  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.105, No.S4・24  
彭 琪, 水関博志, 川添良幸
6. *Ab-Initio* Study of Opto-Electronic Properties of IAO and IATO  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.106, No.S4・27  
Madhvendra Nath Tripathi, K. Shida, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
7. First-Principles Prediction of Half-Metallic Ferromagnetism in Mn Doped  $\beta$  Phase of  $\text{Ge}_3\text{N}_4$   
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.107, No.S4・28  
W. Wang, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
8. 計算材料学の手法  
日本金属学会 2011年春期(第148回)大会

東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.109,  
No.S4・33 (基調講演)  
川添良幸

9.  $\text{LiBH}_4$ における高Liイオン伝導機構

日本金属学会 2011年春期(第148回)大会  
東京都市大学世田谷キャンパス (2011.3.25-27) p.133, No.S7・13  
池庄司民夫, 土田英二, 森下徹也, 池田一貫, 松尾元彰, 川添良幸,  
折茂慎一

10.  $\text{LiBH}_4$ における高いLiイオン伝導の機構

日本物理学会 第66回年次大会  
新潟大学 (2011.3.25-28) p.796, No.28aHA-3  
池庄司民夫, 土田英二, 森下徹也, 池田一貫, 松尾元彰, 川添良幸,  
折茂慎一

11. 負圧効果による $\text{BaTiO}_3$ の強誘電相転移温度の巨大増加

日本物理学会 第66回年次大会  
新潟大学 (2011.3.25-28) p.961, No.25pTM-7  
符徳勝, 深町浩平, 坂元尚紀, 脇谷尚樹, 鈴木久男, 伊藤 満,  
西松 毅

12. 強誘電体メモリのインプリント現象と格子欠陥

日本物理学会 第66回年次大会  
新潟大学 (2011.3.25-28) p.981, No.27pTM-1  
T. Nishimatsu, Y. Kawazoe and U. V. Waghmare

13. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発とその応用

合金状態図 第172委員会 第21回委員会・研究会  
東京 (2011.4.21) (Oral)  
佐原亮二, 水関博志, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸

14. ピレンにおけるStone-Wales 転位の動力学的反応経路：時間分解パワースペクトルによるトラジェクトリ解析

第14回理論化学討論会  
岡山大学創立五十周年記念館 (2011.5.12-14) No.1P07 (Poster)

山崎 馨, 新津直幸, 戸田幹人, 河野裕彦

15. スーパーコンピューティングシステムにおける稼働状況把握  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.9 (poster)  
五十嵐伸昭, 一関京子, 野手竜之介, 石川真二, 勝倉 真, 八鍬友一,  
川添良幸
16. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材料への応用  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.14 (poster)  
佐原亮二, 水関博志, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
17. 強誘電体メモリのインプリント現象と格子欠陥  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.31 (poster)  
西松 毅, 川添良幸, Umesh V. Waghmare
18. 原子レベルのイオンの構造がLangatate材料の圧電性に及ぼす影響の考察と  
新しい圧電結晶の設計  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.35 (poster)  
鄭 燦燁, 八百川律子, 水関博志, 川添良幸
19. Fe (1 0 0) 表面におけるCO及びH<sub>2</sub>Sの吸着に対するアルカリ吸着原子の効  
能 : 第一原理計算  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.46 (poster)  
Muhammad Haris Mahyuddin, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
20. Single Molecule Conductance of Perfluorinated Bipyridyl Ethynes: Mechanism of  
Molecule-Electrode Surface Binding  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.55 (poster)  
L. J. Kang, Y. Y. Liang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

21. 連続化ブートストラップパーコレーションモデル  
第121回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.5.24-25) p.93 (poster)  
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
22. 第一原理計算によるアルカリ金属をドーブした新規水素貯蔵材料の評価  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.64, No.O-02 (Oral)  
水関博志, N. S. Venkataramanan, 陳 剛, 佐原亮二, 川添良幸
23. 電子励起法による分子発光の近接場検出  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.172, No.P1-52 (Poster)  
H. Nejo, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
24. The Elastic and Inelastic Current through the Benzene: A First-Principles Study  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.174, No.P1-54 (Poster)  
Yunye Liang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. エネルギー科学における第一原理ナノシミュレーション(3)  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.175, No.P1-55 (Poster)  
池庄司民夫
26. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材料への応用  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.184, No.P1-64 (Poster)  
佐原亮二, 水関博志, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
27. 原子モデルを用いたランダム粒界および対応粒界の特性評価  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.185, No.P1-65 (Poster)  
水関博志, A. Suvitha, 佐原亮二, 川添良幸

28. 連続化ブートストラップパーコレーションモデル  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.189, No.P1-69 (Poster)  
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
29. Study on the Relationship between Curie Temperature and Effective Exchange Parameter in Iron and its Alloys  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.191, No.P1-71 (Poster)  
Takashi Shigematsu, Jian-Tao Wang, Alberto Martinez-Limia, Lothar Kunz, Thomas Eckl, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
30. 銅クラスターイオンによるCO 酸化反応  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.211, No.P2-1 (Poster)  
平林慎一, 市橋正彦
31. Chemical Engineering of Adamantane by Lithium Functionalization: A First-Principles Density Functional Theory Study  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.215, No.P2-05 (Poster)  
Ahmad Ranjbar, Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
32. Theoretical Study of Small ZnO Nanoparticles  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.219, No.P2-09 (Poster)  
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Dmytruk, I. Dmitruk, A. Kasuya and Y. Kawazoe
33. パーフッ化ビピリジルエチンスの単分子電気伝導率: 分子-電極の表面ボンディングメカニズム  
ナノ学会第9回大会  
北海道大学 (2011.6.2-4) p.244, No.P2-34 (Poster)  
康 利静, 梁 云燁, 水関博志, 川添良幸
34. Calcium-Decorated Graphene for Hydrogen Storage: A van der Waals Density

## Functional Study

ナノ学会第9回大会

北海道大学 (2011.6.2-4) p.247, No.P2-37 (Poster)

Wang Wei, Mizuseki Hiroshi and Kawazoe Yoshiyuki

35. Fe (100) 表面におけるCO及びH<sub>2</sub>Sの吸着に対するアルカリ吸着原子の効能:  
第一原理計算

ナノ学会第9回大会

北海道大学 (2011.6.2-4) p.252, No.P2-42 (Poster)

Muhammad Haris Mahyuddin, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe

36. ペロブスカイト型RRh<sub>3</sub>B<sub>x</sub> (R = La, Gd, Lu, Y, Sc)のホウ素不定化と性質

ナノ学会第9回大会

北海道大学 (2011.6.2-4) p.266, No.P2-56 (Poster)

宍戸統悦, 工藤邦男, 湯蓋邦夫, 森 孝雄, 岡田 繁, 田中雅彦,  
野村明子, 菅原孝昌, 小原和夫, 林 好一, 佐原亮二,  
ビジャイ クマール, 古曳重美, 手嶋勝弥, 吉川 彰, 大石修治,  
川添良幸

37. 原子レベルのイオンの構造がLa<sub>3</sub>Ta<sub>0.5</sub>Ga<sub>5.5</sub>O<sub>14</sub>材料の圧電性に及ぼす影響の考  
察と新しい圧電材料の設計

ナノ学会第9回大会

北海道大学 (2011.6.2-4) p.275, No.P2-65 (Poster)

鄭 燦燁, 八百川律子, 水関博志, 川添良幸

38. ピレン の電子励起状態經由Stone-Wales転位に対する非断熱遷移の影響

平成23年化学系学協会東北大会

東北大学川内キャンパス (2011.9.17-18) No.1P044 (Poster)

山崎 馨, 新津直幸, 河野裕彦

39. ピレンにおける電子励起状態經由Stone-Wales 転位の非断熱反応経路

第5回分子科学討論会2011

札幌コンベンションセンター (2011.9.20-23) No.2E08 (Oral)

山崎 馨, 新津直幸, 河野裕彦

40. 強誘電体ドメイン境界の格子欠陥によるピン留めの分子動力学シミュレーション  
日本物理学会 2011年秋季大会  
富山大学 (2011.9.21-24) p.989, No.22pGN-3 (Oral)  
西松 毅, 川添良幸, Umesh V. Waghmare
41.  $\text{LiBH}_4$ における高Liイオン伝導機構とLi金属との界面挙動  
日本金属学会 2011秋期(第149)大会  
沖縄 (2011.11.7-9) No.298 (Oral)  
池庄司民夫, 土田英二, 森下徹也, 池田一貫, 松尾元彰, 川添良幸,  
折茂慎一
42. 新規水素貯蔵材料のシミュレーション探索研究  
日本金属学会 2011秋期(第149)大会  
沖縄 (2011.11.7-9) No.S4・22 (Oral)  
水関博志, N. S. Venkataramanan, R. V. Belosludov, 佐原亮二, 陳 剛,  
M. Khazaei, 川添良幸
43. ピレンにおけるStone-Wales 転位の非断熱反応経路  
第1回CSJ化学フェスタ  
早稲田大学 大隈記念講堂, (2011.11.13-15), No.P5-05 (Poster)  
山崎 馨, 新津直幸, 中村公亮, 河野裕彦
44. GW法を応用したlangatate材料の酸素vacancyの第一原理計算  
第122回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.11.24-25) p.79  
鄭 燦燁, 八百川律子, 水関博志, 川添良幸
45. Microsolvation of DMSO : Density Functional Study on the Structure and Polarizabilities  
第122回 東北大学金属材料研究所講演会 (2011年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2011.11.24-25) p.83  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Hiroshi Misuseki and  
Y. Kawazoe

<2012年>

1. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材設計への応用  
第2回次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会  
学士会館 (2012.1.26) p.12 No.P-12(Poster)  
佐原亮二, 志田和人, 水関博志, 川添良幸, Marcel Sluiter, 大野かおる
2. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材料開発への応用  
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
次世代ナノ情報機能・材料 成果報告会  
東京大学物性研究所 (2012.2.20-21) p.59, No.PN-13(Poster)  
佐原亮二, 水関博志, Sluiter Marcel, 大野かおる, 川添良幸
3. 全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材料開発への応用  
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
公開シンポジウム  
ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター (2012.3.5-6)  
p.114, No.N-17(Poster)  
佐原亮二, 水関博志, Sluiter Marcel, 大野かおる, 川添良幸
4. Accurate Band Gap Prediction of Langatate Piezoelectric Materials with Oxygen Vacancy  
グローバルCOEプログラム  
東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」  
若手研究者研究報告会  
東北大学金属材料研究所 (2012.3.9) p.46, No.P-032 (Poster)  
Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
5. First Principle Investigation of the Core/Shell Nano-Precipitate in FeCuMnNiAl Alloy  
グローバルCOEプログラム  
東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」  
若手研究者研究報告会  
東北大学金属材料研究所 (2012.3.9) p.50, No.P-036 (Poster)  
L.J. Kang, Y.R. Wen, M.W. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

6. 半透過性酸化物単結晶のふく射伝熱解析へのふく射要素法の適用  
化学工学会第77年会  
工学院大学新宿キャンパス (2012.3.15-17) p.274, No.G215  
阿部敬太, 杉岡健一, 久保正樹, 塚田隆夫, 圓山重直
  
7. ピレンにおけるStone-Wales 転位の断熱・非断熱反応経路  
日本化学会第92春季年会(2012)  
慶應義塾大学日吉キャンパス (2012.3.25-28) No.1A2-54(Oral)  
山崎 馨, 新津直幸, 中村公亮, 河野裕彦
  
8. Structural, Dynamic and Thermodynamic Properties of Ni During the Cooling Process  
日本金属学会講演概要 2012年春期 (第150回) 大会  
横浜国立大学 (2012.3.28-30) p.101  
R. V. Belosludov, 水関 博志, 川添 良幸, D. V. Louzguine-Luzgin,  
井上明久
  
9. 全電子混合基底法プログラムTOMBO による水素分子の解離におけるニッケルダイマーの効果  
日本金属学会講演概要 2012年春期 (第150回) 大会  
横浜国立大学 (2012.3.28-30) p.107  
佐原 亮二, 水関 博志, Marcel Sluiter, 大野 かおる, 川添 良幸
  
10. Fe-Si 二元合金系における熱力学と力学特性に及ぼすSi の影響の第一原理計算  
日本金属学会講演概要 2012年春期 (第150回) 大会  
横浜国立大学 (2012.3.28-30) p.112  
陳 迎, Arkapol SAENGDEEJING, 鈴木 研, 三浦英生, 毛利哲雄
  
11. 金属 | 固体電解質界面でのイオンの挙動 -Li|LiBH<sub>4</sub> の第一原理分子動力学-  
日本金属学会講演概要 2012年春期 (第150回) 大会  
横浜国立大学 (2012.3.28-30) p.371  
池庄司民夫, 高木成幸, 松尾元彰, 川添良幸, 折茂慎一

## VI. 新聞記事

### <2011年>

1. 動き出した東北③一元に戻った国際色豊かな研究室一人としての生き方も教える教育方針ー  
半導体産業新聞 (2011.9.14)
2. 復興へエコ材料活用ーエコマテリアル・フォーラムー  
復興釜石新聞 (2011.10.19)

### <2012年>

1. 有機EL支える国産材料  
日経産業新聞 (2012.3.23)
2. 東北大からスパコン受注  
日経産業新聞 (2012.3.26)

## VII. 雑誌等掲載解説記事

### <2011年>

1. TOhoku Mixed Basis Orbitals *Ab initio* Program (TOMBO)  
IMR KINKEN Research Highlights 2011 (2011) pp.51-52  
R. Sahara, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
2. Magic Monatomic Mn Nanowire Self-Assembly on Si(001)  
IMR KINKEN Research Highlights 2011 (2011) p.85  
J. T. Wang, C. F. Chen, E. G. Wang and Y. Kawazoe
3. 退職のご挨拶  
IMRニュース KINKEN, Vol.67 2011 Autumn (2011.10) p.8  
川添良幸

<2012年>

1. LEDのコスト削減に貢献  
仙台経済界2012 3-4月号(2012.1) pp.42

**VIII. 書籍**

<2011年>

1. 『Computer Simulation of Methane - Helium Gas Mixture Separation by Means of Gas Hydrate Formation』  
Physics and Chemistry of Ice 2010  
Hokkaido University Press (2011) p.183-187  
O. S. Subbotin, Yu. Yu. Bozhko, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov,  
H. Mizuseki, Y. Kawazoe and V. M. Fomin
2. 『Nanodesign and Simulation Toward Nanoelectronic Devices』  
Carbon Nanotubes Applications on Electron Devices  
InTech (2011) pp.233-256, Chapter.10  
Sang Uck Lee and Yoshiyuki Kawazoe
3. 『DFT Perspective of Hydrogen Storage on Porous Materials』  
Energy Storage Hard '11  
Nova Science Publishers (2011) pp.1-27, Chapter.4  
N.S. Venkataramanan and Y. Kawazoe

<2012年>

1. 『FUNCTIONALIZED NANOFULLERENES FOR HYDROGEN STORAGE: A THEORETICAL PERSPECTIVE』  
Handbook on Fullerene: Synthesis, Properties, and Applications,  
Nova Science Publishers (2012.3) pp.363-382, Chapter.8  
N. S. Venkataramanan, A. Suvitha, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

## IX. 表彰・授与

1. 『Oxygen Vacancy Effects on Single Crystalline  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  Piezoelectric Materials』  
6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)  
Singapore (2011.9.6-9)  
「Certificate of Award」  
Chan-Yeup Chung, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
2. 『スーパーコンピューティングシステムにおけるジョブ制御機能の開発』  
日立ITユーザ会 第48会大会 (2011.5.26)  
一般論文「優良賞」  
五十嵐伸昭, 一関京子