

2015 年度スーパーコンピューティングシステム

利用研究成果報告書

(2015 年 4 月～2016 年 3 月)

目 次

『巻頭言』・・・・・・・・・・・・・・・・・・計算材料学センター長 毛利哲夫

I. 研究内容概要

1. 磁気構造シミュレーションによる永久磁石の保磁力モデルの構築……………1
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 塚原宙、小野寛太
2. マルチスケールシミュレーションによる構造材料の電子状態と相安定性解析 ……5
国立研究開発法人物質・材料研究機構 佐原亮二、Wenchong Zhou
名城大学 土屋文
Korea Institute of Science and Technology, Korea 水関博志、Kim Seungchul、
Han Sang Soo、Hur Kahyun、Choi Keunsu
東北大学 Liang Yunye
山梨大学 根城均
3. 金属酸化物と金属錯体の界面の分子動力学計算……………6
東京理科大学総合化学研究科 秋津貴城、町田洋輔
4. 遷移金属薄膜及び希土類金属薄膜の磁性に関する第一原理計算……………9
三重大学大学院工学研究科 中村浩次

5. 鉄における侵入型溶質原子と置換型溶質原子の相互作用とナノクラスタ形成… 12
大阪府立大学工学研究科/JST-CREST 沼倉宏、Souissi Maaouia
6. 公開に向けた全電子混合基底第一原理プログラム TOMBO の改良…………… 15
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、小野頌太
横浜国立大学大学院工学府物理情報工学専攻 Pham Thi Nu、桑畑和明、
青木翼、谷川幸晴
理化学研究所(日本学術振興会 PD) 野田祐輔
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
7. 第一原理計算によるビーライト/水界面における水分子吸着機構の理論解析… 19
秋田工業高等専門学校環境都市工学科 桜田良治
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
日本大学生産工学部 鶴澤正美
太平洋セメント(株)中央研究所 細川佳史
東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
Indian Institute of Science, India Abhishek Kumar Singh
8. Co ドープしたアナターゼ型酸化チタンの微視的構造…………… 21
東京大学理学系研究科 神坂英幸、Thantip S. Krasienapibal、長谷川哲也
東北大学理学系研究科 福村知昭
9. 角度依存を考慮した Fe, Mn 系磁性二元合金の基底状態の解明…………… 24
秋田工業高等専門学校自然科学系 上林一彦
10. 数学的力学系に基づく非平衡材料…………… 26
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 藤田武志
11. マルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発と材料設計への応用… 37
東北大学金属材料研究所 許競翔、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、
久保百司
12. α -D-グルコース結晶のテラヘルツ振動と水和によるスペクトル変化…………… 42
東北大学大学院農学研究科 高橋まさえ

13. First-principles study of physical properties of Fe-based alloy and relevant materials 45
 School of Engineering, Tohoku University Ying Chen, A. Saengdeejing,
 Masato Ohnishi
 National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, China
 Hua Y. Gneg
 School of Engineering, The University of Tokyo Masato Ohnishi
14. 希少元素高効率化抽出技術の基盤要素に関する大規模シミュレーション研究... 50
 東北大学多元物質科学研究所 中村崇
15. 3次元積層造形法における熱伝導シミュレーション..... 55
 東北大学工学研究科材料システム工学専攻 菊池圭子
16. First-principles study of atomic hydrogen and oxygen adsorption on doped surfaces and
 nano-clusters 58
 New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University Nishith K. Das,
 Tetsuo Shoji
17. 流体力学計算方法高度化による新規 PET 用シンチレータ創成を目指した
 結晶成長シミュレーション..... 63
 東北大学未来科学技術共同研究センター 横田有為
18. ファンデルワールス相互作用絶対値算定法開発と新炭素系材料への適用 66
 東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
19. 超低損失磁心材料技術の基盤要素に関する大規模シミュレーション研究 69
 東北大学金属材料研究所 西嶋雅彦
20. 合金相平衡の理論計算 72
 東北大学金属材料研究所 毛利哲夫、山田亮、山田泰徳、珍田祥宏、
 寺田弥生
 大阪大学 譯田真人
 WIGNER Research Centre for Physics, Hungary Laszlo Granasy
 Inst. of Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia Ivan Stich, Brndiar Jan
 IISER, India Ghosh Prasenjit, Kabir Mukul

21. 液体から固体への相変化に関する計算機実験 III 78
東北大学金属材料研究所 HPCI 戦略プログラム計算材料科学研究拠点
寺田弥生、Sankar DebNath
東北大学金属材料研究所 Jean-Claude Crivello
東北大学工学研究科知能デバイス専攻 東村基行
22. 半導体結晶中のキャリア分布計算による欠陥特性の解明 84
東北大学金属材料研究所 沓掛健太朗、杉岡翔太、出浦桃子、大野裕、
米永一郎
23. 原子力材料における照射損傷過程の計算機シミュレーション 87
東北大学金属材料研究所 佐藤裕樹、阿部弘亨、松川義孝、叶野翔、
趙子寿、國井大地、五月女貴平、西村憲治
24. ACCURATE DESCRIPTION OF THERMODYNAMIC PROPERTIES OF
CLATHRATE HYDRATES WITH COMPLEX GUEST COMPOSITIONS FOR
SOLVING URGENT ENVIRONMENTAL ISSUES 89
Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov
25. 原子力関連材料の計算科学的研究 94
東北大学金属材料研究所 小無健司、八登唯夫
26. 近似結晶マッカイクラスタ構造の安定性の解析 97
東北大学金属材料研究所 志村玲子
27. 強誘電体の熱伝導の分子動力学シミュレーション 99
東北大学金属材料研究所 西松毅
28. Fe-Co-Cr 可鍛性磁石鋼におけるスピノーダル分解のフェーズフィールド計算 ... 100
東北大学金属材料研究所 小泉雄一郎、祝迫ひとみ、千葉晶彦
(株)プロスパイン 大沼学、繰谷欽吾
29. 水素化物の計算材料科学 103
東北大学金属材料研究所 高木成幸、佐藤豊人、李関喬、松尾元彰、
折茂慎一
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 池庄司民夫、折茂慎一

30. マルチスケール統合シミュレーター開発と気相成長過程への適用 106
 東北大学金属材料研究所 後藤孝
31. 放射性金属元素除去のためのハイドロフルオロカーボン類の赤外振動の解析..... 108
 東北大学金属材料研究所 山村朝雄、高橋晃
32. バイオマス利用のための酵素反応解析 113
 九州大学 吉田紀生
 立命館大学 平田文男
 東北大学 森田明弘、王琳、城塚達也
33. ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルと
 ダイナミクス 117
 横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、小野頌太、
Swastibrata Bhattacharyya
 横浜国立大学大学院工学府/ダッソーシステムズ・バイオビア(株)
 桑原理一
 理化学研究所(日本学術振興会 PD) 野田祐輔
 国立研究開発法人物質・材料研究機構 佐原亮二
 東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸、志田和人
34. 第一原理分子動力学計算による Pt(322)ステップ表面上での ClO_4^- 下における
 OH 吸着と水の解離及び温度制御の効果 122
 大阪大学大学院工学研究科 木崎栄年、森川良忠
35. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の
 開発 124
 産業技術総合研究所 Vikas Sharma、田中真悟、香川正憲、石橋章司
36. フラストレート磁性体の計算科学的研究 129
 兵庫県立大学物質理学研究科 中野博生

II. 原著論文

<2015 年>

1. Electronic configurations and magnetic anisotropy in organometallic metallocenes ··· 133
J. Appl. Phys., 117 (2015) pp.17E1311-17E1313
Kenji Nawa, Yukie Kitaoka, Kohji Nakamura, Toru Akiyama,
and Tomonori Ito
2. Elastic Properties of Fe-C and Fe-N Martensites ··········· 136
ISIJ Int., 55[7] (2015) pp.1512-1521
Maaouia Souissi, and Hiroshi Numakura
3. SOLUTE-SOLUTE INTERACTION IN α IRON: THE STATUS QUO ········· 146
Arch. Metall. Mater., 60[3] (2015) pp.2061-2068
H. Numakura
4. All-electron *GW* calculation of rutile TiO₂ with and without Nb impurities ········· 154
Phys. Rev. B, 92 (2015) pp.0352051-0352057
Ming Zhang, Shota Ono, and Kaoru Ohno
5. Characteristics of Lithium Ions and Superoxide Anions in EMI-TFSI and Dimethyl
Sulfoxide ··········· 161
J. Phys. Chem. A, 120 (2015) pp.364-371
Sun-ho Jung, Filippo Federici Canova, and Kazuto Akagi
6. Gigahertz Dielectric Polarization of Substitutional Single Niobium Atoms in Defective
Graphitic Layers ··········· 169
Phys. Rev. Lett., 115 (2015) pp.1476011-1476015
Xuefeng Zhang, Junjie Guo, Pengfei Guan, Gaowu Qin,
and Stephen J. Pennycook
7. Visualization of topological landscape in shear-flow dynamics of amorphous solids ··· 174
EPL, 110 (2015) pp.380021-380026
Takeshi Fujita, Koji Ohara, Keiji Miura, Akihiko Hirata,
Motoko Kotani, Yasumasa Nishiura and Mingwei Chen

8. Structural phase transitions in Bi₂Se₃ under high pressure 180
 Sci. Rep., 5 (2015) pp.159391-159399
 Zhenhai Yu, Lin Wang, Qingyang Hu, Jinggeng Zhao, Shuai Yan, Ke Yang,
 Stanislav Sinogeikin, Genda Gu and Ho-kwang Mao

9. Terahertz vibrations of crystalline α -D-glucose and the spectral change in mutual
 transitions between the anhydride and monohydrate 189
 Chem. Phys. Lett., 642 (2015) pp.29-34
 Masae Takahashi, Yoichi Ishikawa

10. Analysis of Non-Monotonic Temperature Behavior of the Coefficient of Thermal
 Expansion in Fe-Ni Alloys Studied by First-Principles Cluster Variation Method 195
 Mater. Trans., 56[9] (2015) pp.1501-1504
 Ryo Yamada, Ying Chen and Tetsuo Mohri

11. Thermodynamic Modeling of the Ni-H System 199
 J. Phys. Chem. C, 119 (2015) pp.24546-24557
 Natacha Bourgeois, Jean-Claude Crivello, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Pierre
 Cenedese, and Jean-Marc Joubert

12. Solvation Mechanism of Task-Specific Ionic Liquids in Water: A Combined
 Investigation Using Classical Molecular Dynamics and Density Functional Theory ... 211
 J. Phys. Chem. B, 119 (2015) pp.12894-12904
 Surya V. J. Yuvaraj, Ravil K. Zhdanov, Rodion V. Belosludov,
 Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki,
 Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe

13. Theoretical Modeling of Oxygen and Water Adsorption on
 Indium Oxide (111) Surface 222
 Photoinduced Processes at Surfaces and in Nanomaterials, 1196[chapter6] (2015)
 pp.137-149
 Talgat Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe,
 and Takashi Nakamura

14. Theoretical selection of most effective ionic liquids for liquid-liquid extraction of NdF_3 235
 Comput. Theor. Chem., 1061 (2015) pp.72-79
 Mariusz Grabda, Sylwia Oleszek, Mrutyunjay Panigrahi, Dmytro Kozak, Franck Eckert, Etsuro Shibata, Takashi Nakamura

15. An alternative second order scheme for curved boundary condition in lattice Boltzmann method 243
 Comput. Fluids, 114 (2015) pp.193-202
 Liangqi Zhang, Zhong Zeng, Haiqiong Xie, Xutang Tao, Yongxiang Zhang, Yiyu Lu, Akira Yoshikawa, Yoshiyuki Kawazoe

16. Numerical study on the radial dopant distribution in micro-pulling-down crystal growth 253
 J. Cryst. Growth, 434 (2015) pp.110-115
 Zhong Zeng, Long Qiao, Yaping Liu, Yuui Yokota, Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa

17. New Phosphorene Allotropes Containing Ridges with 2- and 4-Coordination 259
 J. Phys. Chem. C, 119 (2015) pp.24674-24680
 Jie Liu, Yaguang Guo, Shunhong Zhang, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe, and Puru Jena

18. A New Silicon Phase with Direct Band Gap and Novel Optoelectronic Properties 266
 Sci. Rep., 5 (2015) pp.143421-143427
 Yaguang Guo, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

19. Giant magnetocrystalline anisotropy of 5d transition metal-based phthalocyanine sheet 273
 Phys. Chem. Chem. Phys., 17 (2015) pp.17182-17189
 Jian Zhou, Qian Wang, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

20. TOMBO: All-electron mixed-basis approach to condensed matter physics 281
 Comput. Phys. Commun., 189 (2015) pp.20-30
 Shota Ono, Yoshifumi Noguchi, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno

21. Role of Interlayer Coupling on the Evolution of Band Edges in Few-Layer Phosphorene292
 J. Phys. Chem. Lett., 6 (2015) pp.4876-4883
 V. Wang, Y. C. Liu, Y. Kawazoe, and W. T. Geng
22. Atomic packing and diffusion in Fe₈₅Si₂B₉P₄ amorphous alloy analyzed by *ab initio* molecular dynamics simulation 300
 J. Appl. Phys., 117 (2015) pp.17B7051-17B7054
 Yaocen Wang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino, Yunye Liang, and Yoshiyuki Kawazoe
23. Magnetic Influence of Alloying Elements in Fe-Rich Amorphous Alloys Studied by *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulations 304
 IEEE Trans. Magn., 51[11] (2015) pp.20065041-20065044
 Yaocen Wang, Yan Zhang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino, Yunye Liang, and Yoshiyuki Kawazoe
24. First-principles calculations of stability and phase equilibria in the Fe-Ni system 308
 J. Mater. Sci., 50 (2015) pp.7705-7712
 Tetsuo Mohri
25. Ternary eutectic dendrites: Pattern formation and scaling properties 316
 J. Chem. Phys., 142 (2015) pp.1545011-14550111
 László Rátkai, Attila Szállás, Tamás Pusztai, Tetsuo Mohri and László Gránasy
26. Atomic force microscopy identification of Al-sites on ultrathin aluminum oxide film on NiAl(110)..... 327
 Nanotechnology, 26 (2015) pp.5057041-5057045
 Yan Jun Li, J. Brndiar, Y. Naitoh, Y. Sugawara and I. Štich
27. Selective gas adsorption in microporous metal– organic frameworks incorporating urotropine basic sites: an experimental and theoretical study 332
 Chem. Comm., 51 (2015) pp.13918-13921
 S. A. Sapchenko, D. N. Dybtsev, D. G. Samsonenko, R. V. Belosludov, V. R. Belosludov, Y. Kawazoe, M. Schröder and V. P. Fedin

28. Probing Electronic Communications in Heterotrinary Fe–Ru–Fe Molecular Wires Formed by Ruthenium(II) Tetraphenylporphyrin and Isocyanoferrrocene or 1,1'-Diisocyanoferrrocene Ligands 336
Inorg. Chem., 54 (2015) pp.10711-10724
 Victor N. Nemykin, Semyon V. Dudkin, Mahtab Fathi-Rasekh, Andrew D. Spaeth, Hannah M. Rhoda, Rodion V. Belosludov, and Mikhail V. Barybin
29. Mechanisms of lamellar structure formation and Cr interfacial segregation in C11_b-MoSi₂/C40-NbSi₂ dual phase silicide verified by a phase-field simulation incorporating elastic inhomogeneity 350
Comput. Mater. Sci., 108 (2015) pp.358-366
 Toshihiro Yamazaki, Yuichiro Koizumi, Koretaka Yuge, Akihiko Chiba, Koji Hagihara, Takayoshi Nakano, Kyosuke Kishida, Haruyuki Inui
30. Recent progress in hydrogen-rich materials from the perspective of bonding flexibility of hydrogen 359
Scr. Mater., 109 (2015) pp.1-5
 Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo
31. True Boundary for the Formation of Homoleptic Transition-Metal Hydride Complexes 364
Angew. Chem. Int. Ed., 54 (2015) pp.5650-5653
 Shigeyuki Takagi, Yuki Iijima, Toyoto Sato, Hiroyuki Saitoh, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, Kazutoshi Miwa, Tamio Ikeshoji, Katsutoshi Aoki, and Shin-ichi Orimo
32. Complex transition metal hydrides incorporating ionic hydrogen: Synthesis and characterization of Na₂Mg₂FeH₈ and Na₂Mg₂RuH₈ 368
J. Alloys Compd., 645 (2015) pp.S347-S352
 Terry D. Humphries, Shigeyuki Takagi, Guanqiao Li, Motoaki Matsuo, Toyoto Sato, Magnus H. Sørby, Stefano Deledda, Bjørn C. Hauback, Shin-ichi Orimo

33. Sources of *n*-type conductivity in GaInO₃374
J. Phys. D: Appl. Phys., 48 (2015) pp.0151011-0151017
V. Wang, W. Xiao, L-J. Kang, R-J. Liu, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
34. The Schottky barrier modulation at PtSi/Si interface by strain and structural deformation 381
AIP Adv., 5 (2015) pp.0871091-08710910
Pooja Srivastava, Mincheol Shin, Kwang-Ryeol Lee, Hiroshi Mizuseki and Seungchul Kim
35. Computational Study on the Interactions of Mustard Gas with Cucurbituril Macrocycles 391
Int. J. Quantum Chem., 115 (2015) pp.1515-1525
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ambigapathy Suvitha, Hiroshi Mizuseki, and Yoshiyuki Kawazoe
36. A 3D-RISM/RISM study of the oseltamivir binding efficiency with the wild-type and resistance-associated mutant forms of the viral influenza B neuraminidase 402
Protein Sci., 25 (2015) pp.147-158
Jiraphorn Phanich, Thanyada Rungrotmongkol, Daniel Sindhikara, Saree Phongphanphanee, Norio Yoshida, Fumio Hirata, Nawee Kungwan, and Supot Hannongbua
37. Three-Dimensional Reference Interaction Site Model Self-Consistent Field Analysis of Solvent and Substituent Effects on the Absorption Spectra of Brooker's Merocyanine 414
J. Comput. Chem., 36 (2015) pp.1655-1663
Yuichi Tanaka, Norio Yoshida, and Haruyuki Nakano
38. Theoretical analysis of co-solvent effect on the proton transfer reaction of glycine in a water-acetonitrile mixture 423
J. Chem. Phys., 142 (2015) pp.2041031-2041039
Yukako Kasai, Norio Yoshida, and Haruyuki Nakano

39. Liquid/liquid interface layering of 1-butanol and [bmim]PF₆ ionic liquid: a nonlinear vibrational spectroscopy and molecular dynamics simulation study432
Phys. Chem. Chem. Phys., 17 (2015) pp.24587-24597
Takashi Iwahashi, Tatsuya Ishiyama, Yasunari Sakai, Akihiro Morita,
Doseok Kim, and Yukio Ouchi
40. Construction of exchange repulsion in terms of the wave functions at QM/MM boundary region 443
J. Chem. Phys., 143 (2015) pp.0841041-07410411
Hideaki Takahashi, Satoru Umino, and Akihiro Morita
41. Microscopic Barrier Mechanism of Ion Transport through Liquid-Liquid Interface454
J. Am. Chem. Soc., 137[25] (2015) pp.8022-8025
Nobuaki Kikkawa, Lingjian Wang, and Akihiro Morita
42. Surface Structure of Methanol/Water Solutions via Sum Frequency Orientational Analysis and Molecular Dynamics Simulation 458
J. Phys. Chem. C, 119[18] (2015) pp.9879-9889
Takashi Ishihara, Tatsuya Ishiyama, and Akihiro Morita
43. Geometry Dependence of Electronic and Energetic Properties of One-Dimensional Peanut-Shaped Fullerene Polymers 469
J. Phys. Chem. A, 119 (2015) pp.3048-3055
Yusuke Noda, Shota Ono, and Kaoru Ohno
44. Capped carbon nanotube photovoltaic cells: Influence of distribution of the five-membered rings on the efficiency 477
Diamond Relat. Mater., 58 (2015) pp.24-30
Shota Ono, Kousei Tanikawa, Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno
45. Magnetization Jump in the Magnetization Process of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Square-Kagome Lattice 484
J. Phys. Soc. Jpn., 84 (2015) pp.1147031-1147036
Hiroki Nakano, Yasumasa Hasegawa, and Toru Sakai

46. Magnetization Process of the Spin-S Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet ...490
 J. Phys. Soc. Jpn., 84 (2015) pp.0637051-0637055
 Hiroki Nakano and Toru Sakai
47. Theoretical investigation of effect of alloying elements on phase stability in
 body-centered cubic Ti-X alloys (X=V, Cr, Fe, Co, Nb, and Mo)495
 J. Alloys Compd., 634 (2015) pp.193-199
 Ryoji Sahara, Satoshi Emura, Koichi Tsuchiya
48. Giant perpendicular magnetocrystalline anisotropy of 3d transition-metal thin films
 on MgO 502
 J. Appl. Phys., 117 (2015) pp.17C7311-17C7313
 Kohji Nakamura, Yushi Ikeura, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
49. Electrocaloric response of KNbO₃ from a first-principles effective Hamiltonian 505
 Mater. Sci. Eng. B, 196 (2015) pp.40-43
 J. A. Barr, S. P. Beckman
50. Comparison of the electronic band structures of LiCaAlF₆ and LiSrAlF₆ ultraviolet
 laser host media from ab initio calculations 509
 Jpn. J. Appl. Phys., 54 (2015) pp.1226021-1226026
 Mui Viet Luong, Marilou Cadatal-Raduban, Melvin John F. Empizo, Ren Arita,
 Yuki Minami, Toshihiko Shimizu, Nobuhiko Sarukura, Hiroshi Azechi,
 Minh Hong Pham, Hung Dai Nguyen, amd Yoshiyuki Kawazoe
51. Effect of chemical functionalization groups on Zr₆-AzoBDC to enhance H₂, CH₄
 storage and CO₂ capture: a theoretical investigation 515
 Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol., 6 (2015) pp.0350111-0350116
 Khung M Trang, Hung Q Pham and Nguyen-Nguyen Pham-Tran
52. Cluster characteristics and physical properties of binary Al–Zr intermetallic compounds
 from first principles studies 521
 Comput. Mater. Sci., 103 (2015) pp.170-178
 Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe

<2016 年>

1. Theoretical Investigation of Stabilizing Mechanism by Boron in Body-Centered Cubic Iron Through $(\text{Fe,Cr})_{23}(\text{C,B})_6$ Precipitates 530
Metall. Mater. Trans. A , 47A[MAY] (2016) pp.2487-2497
Ryoji Sahara, Tetsuya Matsunaga, Hiromichi Hongo,
and Masaaki Tabuchi
2. Effects of uniaxial compressive strain on the electronic-transport properties of zigzag carbon nanotubes 541
Nano Res., 9[5] (2016) pp.1267-1275
Masato Ohnishi, Ken Suzuki, and Hideo Miura
3. Ab Initio Investigation of O-H Dissociation from the Al-OH₂ Complex Using Molecular Dynamics and Neural Network Fitting 550
J. Phys. Chem. A, 120 (2016) pp.346-355
Thi H. Ho, Nguyen-Nguyen Pham-Tran, Yoshiyuki Kawazoe, and Hung M. Le
4. Electrochemical Potential Derived from Atomic Cluster Structures 560
J. Phys. Chem. Lett., 7 (2016) pp.567-571
Jinglian Du, Debao Xiao, Bin Wen, Roderick Melnik, and Yoshiyuki Kawazoe
5. Three Dimensional Metallic Carbon from Distorting sp^3 -Bond 565
Cryst. Growth Des., 16 (2016) pp.1360-1365
Yong Cheng, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe, and Bin Wen
6. Novel three dimensional topological nodal line semimetallic carbon 571
Carbon, 98 (2016) pp.468-473
Yong Cheng, Jinglian Du, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe, Bin Wen
7. Cation diffusion and hybridization effects at the Mn-GaSe(0001) reacted interface:
Ab initio calculations and soft x-ray electron spectroscopy studies 577
Phys. Rev. B, 93 (2016) pp.1153041-11530414
S. Dash, N. Joshi, G. Drera, P. Ghosh, E. Magnano, F. Bondino, P. Galinetto,
M. C. Mozzati, G. Salvinelli, V. Aguekian, and L. Sangaletti

8. Coordination polymers of Fe(III) and Al(III) ions with TCA ligand: distinctive fluorescence, CO₂ uptake, redox-activity and oxygen evolution reaction 591
 Dalton Trans., 45 (2016) pp.6901-6908
 Barun Dhara, Subrahmanyam Sappati, Santosh K. Singh, Sreekumar Kurungot, Prasenjit Ghosh, and Nirmalya Ballav

9. Theoretical Prediction of Macroscopic Yield Strength for Fe Alloy Based on Atomistic Study 599
 J. Japan Inst. Met. Mater. , 80[3] (2016) pp.197-205
 Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, and Shigenobu Ogata

10. Structure and stability of clean and adsorbate covered intermetallic PdGa surfaces: A first principles study 608
 Surf. Sci., 644 (2016) pp.69-79
 Nandha Kumar, Prasenjit Ghosh

11. Charged vanadium-benzene multidecker clusters: DFT and quantum Monte Carlo study 619
 J. Chem. Phys., 144 (2016) pp.0643031-0643039
 K. Tokár, R. Derian, L. Mitas, and I. Štich

12. Lattice Statistics and Dynamics within Cluster Variation Method 628
 Mater. Trans., 57[4] (2016) pp.481-487
 Yasunori Yamada, and Tetsuo Mohri

13. Theoretical analysis of complex formation of *p*-carboxybenzeneboronic acid with a monosaccharide 635
 J. Mol. Liq., 217 (2016) pp.93-98
 Yuki Seno, Norio Yoshida, Haruyuki Nakano

14. Hydrogen-Bonding Structure at Zwitterionic Lipid/Water Interface 641
 J. Phys. Chem. Lett., 7[2] (2016) pp.216-220
 Tatsuya Ishiyama, Daichi Terada, and Akihiro Morita

15. Minimal model for charge transfer excitons at the dielectric interface646
Phys. Rev. B, 93 (2016) pp.1213011-1213015
Shota Ono and Kaoru Ohno

III. 国際会議発表論文

< Proceeding >

1. 3D MODELING OF FERRITE TRANSFORMATION IN DEFORMED- AUSTENITE USING MULTI-PHASE-FIELD METHOD AND CRYSTAL PLASTICITY FAST FOURIER TRANSFORMATION METHOD651
Proceedings of the International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2015, (2015), pp.857-864
International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2015(PTM2015)
Akinori Yamanaka

2. FIRST-PRINCIPLES STUDY OF NI DOPING EFFECT ON MECHANICAL PROPERTIES OF DILUTE FE-SI ALLOY 659
Proceedings of the International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2015, (2015), pp.911-912
International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2015(PTM2015)
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Tetsuo Mohri

3. STRUCTURAL ANALYSIS OF BETA-DICALCIUMSILICATE MODIFIED BY INCORPORATION OF TRACE ELEMENT 661
Proceedings of the 40th Conference on Our World in Concrete & Structures, Vol.34, (2015), pp.435-442
40th Conference on Our World in Concrete & Structures
R. Sakurada, M. Uzawa, Y. Hosokawa, Y. Kawazoe, A. K. Singh

4. Anomalous anisotropic compression behavior of superconducting CrAs under high pressure 669
PNAS, 112[48] (2015), pp.14766-14770
Zhenhai Yu, Wei Wu, Qingyang Hu, Jinggeng Zhao, Chunyu Li, Ke Yang, Jinguang Cheng, Jianlin Luo, Lin Wang, and Ho-kwang Mao

<2015 年>

1. First-Principles Simulations of Water Dissociation and Adsorption of OH Groups under a ClO₄ molecule on Pt(322) Stepped Surface674
114th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry
Ruhr university, Bochum, Germany (2015.5.14-16) (Poster)
Hidetoshi Kizaki, Ikutaro Hamada, Yoshitada Morikawa

2. Dispersion-corrected First-Principles Calculations of Terahertz Spectra and Detection of Noncovalent Bonding Interaction675
BIT's 4th Annual World Congress of Advanced Materials-2015
Chongqing International Convention & Exhibition Center, Chongqing, China
(2015.5.27-30) No.182 (Invited)
Masae Takahashi

3. Materials Design on Energy-related Materials by Multiscale Simulations676
The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan
(2015.6.16-18) No.64 (Invited)
Hiroshi Mizuseki

4. Elastic Properties of Dilute Si in Fe-Si Alloy and Effect of Ni-Doping: An Integrated Study Based on First-Principles677
The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan
(2015.6.16-18) (Invited)
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing

5. First principles study of electronic structures and stability in structural materials678
The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan
(2015.6.16-18) (Invited)
Ryoji Sahara

6. First-principles study of stability of Cu in the Nd-rich and Nd Oxide phases of Nd-Fe-B permanent magnet679
 The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
 National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan (2015.6.16-18) No.3A-3 (Oral)
 A. Saengdeejing, Y. Chen, M. Matsuura, S. Sugimoto

7. A DFT Study on Properties of [BMIM][NTF₂] IL Functionalized with Alkyl Amine Chains680
 The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
 National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan (2015.6.16-18) (Poster)
 Surya V. J. Yuvaraj, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Ravil Zhdanov, Oleg S. Subbotin, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe

8. Investigation on Pair Stability of Imidazolium Cations with PGM Chloroanions681
 The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
 National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan (2015.6.16-18) (Poster)
 Surya V. J. Yuvaraj, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Ravil Zhdanov, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe

9. The First-principles Mapping onto the Phase Field Crystal Model682
 The 8th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS8)
 National Taiwan University of Science and Technology (NTUST), Taipei, Taiwan (2015.6.16-18) (Poster)
 Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara

10. First-principles modeling of stability of Nd-O and Cu in the Nd-rich phase of Nd-Fe-B683
 ESICMM-G8 Symposium on Next Generation Permanent Magnets
 National Institute for Materials Science
 Tsukuba, Ibaraki, Japan (2015.6.18-19) No.Session3-1 (Oral)
 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto
11. CVM as a theoretical tool in Integrated Computational Materials Designing684
 1st US-Japan Materials Genome Workshop
 International Congress Center "Epochal Tsukuba",
 Ibaraki, Japan (2015.6.23-24) (Plenary)
 Tetsuo Mohri
12. Cluster Variation Method as a theoretical tool for the Study of phase transformation685
 International Conference on Solid- Solid Phase Transformations in Inorganic
 Materials 2015(PTM2015)
 The Westin Resort & Spa, Whistler, Canada (2015.6.28-2015.7.3)
 Tetsuo Mohri
13. Extraction of Neodymium from Aqueous Phase to Preselected Ionic Liquids - Insights
 from Quantum Chemical Calculations687
 Iberoamerican Meeting on Ionic Liquids (IMIL 2015)
 Madrid, Spain (2015.7.2-3) No.P50 (Poster)
 Mariusz Grabda, Sylwia Oleszek, Dmytro Kozak, Mrutyunjay Panigrahi,
 Etsuro Shibata, Takashi Nakamura
14. Anomalous hall conductivity at uncompensated antiferromagnetic interfaces688
 20th International Conference on Magnetism
 Barcelona, Spain (2015.7.5-10) No.FR.H-P12 (Oral)
 K. Nakamura, M. Ikuta, T. Akiyama, T. Ito

15. Large-scale micromagnetics simulation for magnetization reversal process in Nd-Fe-B nanocrystalline magnets under periodic boundary condition.....689
 20th International Conference on Magnetism
 Barcelona, Spain (2015.7.5-10) No.TU.H-P57 (Poster)
 H. Tsukahara, K. Iwano, N. Inami, T. Ishikawa, C. Mitsumata and K. Ono
16. Mechanical properties of dilute Si in Fe-Si alloy and Ni-doping effect: an integrated study based on first principles690
 2015 International Symposium on Multi-scale Modeling and Simulation of Materials
 Beijing, China (2015.7.5-9) No.24 (Invited)
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Tetsuo Mohri
17. Theoretical analysis on structure and function of solution and polymer interfaces691
 International Symposium on "Studying the Function of Soft Molecular Systems
 Tokyo, Japan (2015.7.9-11) (Invited)
 Akihiro Morita
18. Electronic Structures and Magnetocrystalline Anisotropy of Rare-Earth Ultra-Thin Films693
 17th International Conference on Modulated Semiconductor Structures
 Sendai International Conference Center, Sendai, Japan (2015.7.26-31)
 No.Tu-PM-20 (Poster)
 Y. Ikeura, K. Nawa, K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito
19. Defect engineering of multicrystalline and mono-like silicon for solar cells: Characterization and control of grain boundaries and dislocations694
 25th Workshop on Crystalline Silicon Solar cells & Modules: Materials and Processes
 Keystone, Colorado, USA. (2015.7.26-29) (Oral)
 Kentaro Kutsukake, Momoko Deura, Yutaka Ohno, and Ichiro Yonenaga

20. Thermodynamic Properties of Carbon Dioxide Clathrate Hydrates toward CCUS application 700
 250th American Chemical Society National Meeting & Exposition
 Boston, USA. (2015.8.16-20) (Oral)
 Rodion Belosludov, Oleg Subbotin, Ravil Zhdanov, Vladimir Belosludov,
 Yoshiyuki Kawazoe
21. First-principles modelling of NdO_x phase formation at Nd/Nd-Fe-B interface 701
 1st International Conference on Computational Design & Simulation of Materials
 (CDSM2015)
 IMR, Shenyang, Liaoning, China (2015.8.17-20) No.O-32 (Invited)
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto
22. Water Dissociation Process on Titanium Dioxide Nanocluster: A Time-dependent
 Density Functional Theoretical Study 702
 International Conference of Pacific Rim Ceramic Societies (PACRIM-11)
 ICC Jeju, Jeju, Korea (2015.8.30-2015.9.4) No.TuP1-3 (Oral)
 Hiroshi Mizuseki and Ryoji Sahara
23. A first principles study of strengthening mechanism by boron in body-centered cubic
 iron through (Fe,Cr)₂₃(C,B)₆ precipitates 703
 PSI-K 2015 CONFERENCE
 Kursaal event centre, San Sebastian-Donostia, Spain (2015.9.6-10) (Poster)
 Ryoji Sahara, Tetsuya Matsunaga, Hiromichi Hongo, and Masaaki Tabuchi
24. First-principles modelling of NdO_x phase at Nd/Nd-Fe-B interface 704
 The 2015 E-MRS Fall Meeting and Exhibit
 Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland(2015.9.15-18) No.38
 (Invited)
 Ying Chen, A. Saengdeejing, M. Matsuura, S. Sugimoto

25. On the high T_C ferromagnetism in Co-doped TiO_2 705
 The 2015 E-MRS Fall Meeting and Exhibit
 Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland(2015.9.15-18) No.V.2.12
 (Oral)
 Thantip S. Krasienapibal, Tomoteru Fukumura, Hideyuki Kamisaka,
 Tetsuya Hasegawa
26. Two-component density functional study of positron-monovacancy interaction in
 metals706
 1st SIP-IMASM International Symposium 2015
 AIST Tsukuba campus, Japan (2015.9.29-2015.10.1) (Poster)
 Shoji Ishibashi
27. COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN ON HIGH-PERFORMANCE GAS
 SEPARATION MATERIALS709
 International Conference on Functional Materials for Frontier Energy Issues in
 Novosibirsk 2015
 Novosibirsk, Russia (2015.10.1-5) No.8 (Invited)
 Mizuseki H., Choi K.
28. FIRST-PRINCIPLES MODELLING OF FORMATION AND EFFECT OF NdO_x
 PHASE IN GRAINBOUNDARY OF Nd-Fe-B710
 International Conference on Functional Materials for Frontier Energy Issues in
 Novosibirsk 2015
 Novosibirsk, Russia (2015.10.1-5) No.9 (Invited)
 Chen Y., Saengdeejing A., Matsuura M. and Sugimoto S.
29. NANOPOROS MATERIALS FOR ENERGY STORAGE: THEORETICAL
 ASPECTS711
 International Conference on Functional Materials for Frontier Energy Issues in
 Novosibirsk 2015
 Novosibirsk, Russia (2015.10.1-5) No.16 (Invited)
 Rodion Belosludov

30. THEORETICAL STUDY ON TASK SPECIFIC IONIC LIQUID FOR METAL EXTRACTION FROM GARBAGE CAUSED BY TSUNAMI712
 International Conference on Functional Materials for Frontier Energy Issues in Novosibirsk 2015
 Novosibirsk, Russia (2015.10.1-5) No.17 (Invited)
 Kawazoe Y.
31. Investigation on Pair Stability of Imidazolium Cations with PGM Chloroanions in solvents713
 The Second Project Report Meeting of the HPCI System Including K computer in the fiscal year 2015
 The National Museum of Emerging Science and Innovation, Tokyo, Japan (2015.10.26) (Poster)
 Surya V. J. Yuvaraj, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Ravil Zhdanov, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe
32. Investigation on Pair Stability of Imidazolium Cations with PGM Chloroanions in solvents714
 Critical Metal Symposium in Sendai
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.10.28-30) (Poster)
 Surya V. J. Yuvaraj, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Ravil Zhdanov, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe
33. Theoretical selection of ionic liquids for L-L extraction of Nd and Dy715
 Critical Metal Symposium in Sendai
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.10.28-30) (Poster)
 Mariusz Grabda, Sylwia Oleszek, Mrutyunjay Panigrahi, Dmytro Kozak, Franck Eckert, Etsuro Shibata, Takashi Nakamura

34. Detection of noncovalent bonding with dispersion-corrected first-principles calculations of Terahertz spectra716
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Invited-1 (Invited)
 Masae Takahashi
35. THEORETICAL STUDY OF FUNCTIONAL NANOPOROUS MATERIALS.....717
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Invited-18 (Invited)
 Rodion Belosludov and Y. Kawazoe
36. Analysis of free energy calculation of the alloy system: Fe-Si as an example.....718
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Invited-21 (Invited)
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing and Tetsuo Mohri
37. TOMBO Ver.2 Tutorial719
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Invited-22 (Invited)
 Kaoru Ohno
38. The first-principles mapping onto the phase field crystal model736
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-4 (Oral)
 Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, and Ryoji Sahara
39. Elastic properties of Fe-C and Fe-N martensites.....737
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-13 (Oral)
 Maaouia Souissi, Hiroshi Numakura

40. Momentum-dependent band spin splitting in MnO₂ crystals: A first-principles investigation 738
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-20 (Oral)
 Yusuke Noda, Kaoru Ohno, and Shinichiro Nakamura
41. Adsorption of Water Molecule on Beta-Form Belite Surface: Analysis Based on Ab-Initio Study 739
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-22 (Oral)
 Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa,
 Yoshiyuki Kawazoe, Aaditya Manjanath, and Abhishek Kumar Singh
42. Case Study 2 with TOMBO: Self-Consistent Linearized GWT + Bethe-Salpeter Equation Approach for Small Atomic Systems 740
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-26 (Oral)
 Riichi Kuwahara, Yoshifumi Noguchi, and Kaoru Ohno
43. To increase usability of TOMBO: Introduction of Pipeline Pilot and TOMBO Interface 741
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.Oral-27 (Oral)
 Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
44. Phase Stability of the Binary Systems Present in the Nd-Fe-B-Dy-Cu-O Multicomponent System 742
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-9 (Poster)
 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto

45. Dynamic packing simulation for spherical metal particles 743
The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual
Organization (ACCMS-VO10)
Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-15 (Poster)
Keiko Kikuchi, Naoyuki Nomura, Akira Kawasaki
46. Hydrogen adsorption reactions of carbon mono-oxide producing methanol 744
The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual
Organization (ACCMS-VO10)
Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-19 (Poster)
Pham Thi Nu, Kazuaki Kuwahata, Shota Ono, and Kaoru Ohno
47. Application of extended quasiparticle equation to isolated atoms 745
The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual
Organization (ACCMS-VO10)
Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-20 (Poster)
Tomoharu Isobe, Shota Ono, and Kaoru Ohno
48. Implementation of hyperfine tensor in TOMBO Ver.2 746
The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual
Organization (ACCMS-VO10)
Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-21 (Poster)
Shota Kanno, Shota Ono, and Kaoru Ohno
49. *Ab initio* calculation of CO + H reaction on H₂O cluster 747
The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual
Organization (ACCMS-VO10)
Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) No.PS-22 (Poster)
Kazuaki Kuwahata, Shota Ono, and Kaoru Ohno

50. Properties of Imidazolium and Phosphonium Ionic liquids – A DFT Study..... 748
 The 10th Asian Consortium on Computational Materials Science — Virtual Organization (ACCMS-VO10)
 Tohoku University, Sendai, Japan (2015.11.1-3) (Poster)
 Surya V. J. Yuvaraj, Ravil Zhdanov, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, and Yoshiyuki Kawazoe
51. Electric-field-induced Modification of Magnetism in Metal Ferromagnets..... 749
 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations
 The University of Tokyo, Kashiwa, Japan (2015.11.9-11) No.Invited talk:6 (Invited)
 Kohji Nakamura
52. Magnetocrystalline Anisotropy in Rare-earth metal monolayers 750
 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations
 The University of Tokyo, Kashiwa, Japan(2015.11.9-11) No.Poster:54 (Poster)
 Yushi Ikeura, Kenji Nawa, Kohji Nakamura, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
53. Simulation Approach to Design of Nanoporous Materials for Gas Storage and Separation Application 751
 2015 MRS Fall Meeting & Exhibit
 Boston, Massachusetts, USA. (2015.11.29-2015.12.4) (Oral)
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, V. R. Belosludov and Y. Kawazoe
54. Impurities on Solidification Process of Monolayer Colloids by Advection Accumulation Method 752
 2015 MRS Fall Meeting & Exhibit
 Boston, Massachusetts, USA. (2015.11.29-2015.12.4) No.WW8 (Poster)
 Yayoi Terada

55. Current update in Application of THz spectroscopy - to biological system from medicines 753
Energy, Materials and Nanotechnology, Hong Kong Meeting
The Eaton Hotel, Hong Kong, China (2015.12.9-12) No.A12 (Invited)
Masae Takahashi
56. Computational SFG analysis of organic liquid surfaces 754
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015
(Pacifichem 2015)
Honolulu, Hawaii, USA. (2015.12.15-20) No.1734 (Invited)
Akihiro Morita, Lin Wang, and Tatsuya Ishiyama
57. Clathrate hydrates as materials for hydrogen storage applications: theoretical aspects 755
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015
(Pacifichem 2015)
Honolulu, Hawaii, USA. (2015.12.15-20) (Oral)
Rodion Belosludov
58. Nanoscopic analysis of oxygen vacancy in nuclear oxide fuel 756
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015
(Pacifichem 2015)
Honolulu, Hawaii, USA. (2015.12.15-20) (Oral)
K. Konashi, T. Yato, M. Kato, M. Watanabe, T. Yaita, H. Shiwaku
59. Multiscale implementation of 3D-RISM to the electronic structure theory being applicable for solvated biomolecules 757
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015
(Pacifichem 2015)
Honolulu, Hawaii, USA. (2015.12.15-20) (Oral)
Norio Yoshida

<2016 年>

1. Magnetocrystalline anisotropy in rare-earth metal ultra-thin films758
2016 Joint MMM & Intermag Conference
San Diego, USA. (2016.1.11-15) No.HI-15 (Oral)
Kenji Nawa, Yushi Ikeura, Kohji Nakamura, Toru Akiyama, Tomonori Ito,
Tamio Oguchi, Michael Weinert

2. Theoretical study of biological processes employing statistical mechanics of
molecular liquids759
Pure and Applied Chemistry International Conference 2016
BITEC, Bangkok, Thai (2016.2.9-11) (Invited)
Norio Yoshida

3. First-principles modelling of grain boundary phase in Nd-Fe-B permanent magnet.....760
TMS2016 145th Annual Meeting & Exhibition
MUSIC City Center, Nashville, Tennessee, USA. (2016.2.14-18) (Oral)
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Masashi Matsuura, and Satoshi Sugimoto

4. GROUND STATE MAPS OF BINARY METAL HYDROGEN SYSTEMS761
10th International Symposium on Hydrogen & Energy
Zao, Japan (2016.2.21-26) (Oral)
J.-C. Crivello, N. Bourgeois, T. Mohri, J.-M. Joubert

5. Microstructural evolution in MoSi₂-based dual phase ultrahigh temperature structural
material by phase-field method762
2016 Japan-Russia Joint Seminar "Advanced Materials Synthesis Process and
Nanostructure" in conjunction with 2015 Annual Meeting of Excellent Graduate
Schools for "Materials Integration Center" and "Materials Science Center"
Akiu, Sendai, Japan (2016.3.18-19) (Oral)
Toshihiro Yamazaki, Yuichiro Koizumi, Akihiko Chiba, Koretaka Yuge,
Kyosuke Kishida, Haruyuki Inui

6. Understanding the mechanism of hydrogen-accelerated oxidation in nickel- based alloys:
A combined DFT and tight-binding QCMD study.....763
International Symposium on Material Service Performance in Nuclear Power
Plants-2016
Shanghai University, Shanghai, China (2016.3.23) (Invited)
Nishith Kumar Das and Tetsuo Shoji

IV. 予稿集

<2015 年>

1. チャネルロドプシンのイオン輸送経路探索～液体論によるアプローチ～ ……765
分子研研究会「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」
自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター(2015.4.20-21) (Invited)
吉田紀生
2. Local Energy and Local Stress by QMAS: Application to Materials Interfaces ……766
The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015
ISSP, the University of Tokyo, Tokyo, Japan(2015.5.11-13) (Invited)
Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma,
Shingo Tanaka, and Yoshinori Shiihara
3. Local-Energy and Local-Stress Study of Fe(001)/TiC(001) Coherent Interface ……767
The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015
ISSP, the University of Tokyo, Tokyo, Japan (2015.5.11-13) (Poster)
Vikas Sharma, Shingo Tanaka, Yoshinori Shiihara and Masanori Kohyama
4. セラミックス核燃料における欠陥構造の第一原理モデリング ……768
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.O-42 (Oral)
陳迎
5. First principles study on pair stability between imidazolium cations and PGM
chloroanions ……769
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-07 (Poster)
Surya V. J. Yuvaraj, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov,
Oleg S. Subbotin, Ravil Zhdanov, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki,
Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, Hiroshi Mizuseki,
and Yoshiyuki Kawazoe

6. GW+Bethe-Salpeter 方程式による XANES スペクトルの第一原理計算770
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-09 (Poster)
青木翼、小野頌太、大野かおる
7. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料開発771
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-10(Poster)
佐原亮二、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、川添良幸
8. カーボンナノチューブ・亜鉛フタロシアニン有機太陽電池の
エネルギー変換効率のキャップ構造依存性772
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-27(Poster)
谷川幸晴、小野頌太、桑原理一、大野かおる
9. 時間依存密度汎関数理論による分子動力学シミュレーション773
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-44 (Poster)
Pham Thi Nu, Ohno Kaoru
10. Magnetic exchange in Fe-rich soft magnetic amorphous alloys774
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-51 (Poster)
Yaocen Wang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino, Yunye Liang,
Yoshiyuki Kawazoe
11. 第一原理計算によるセメントクリンカーの結晶構造解析775
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-61 (Poster)
桜田良治、鶴澤正美、細川佳史、川添良幸、Abhishek Kumar Singh
12. 氷表面における分子吸着エネルギーの被覆率依存性776
ナノ学会第 13 回大会
東北大学 片平さくらホール(2015.5.11-13) No.P3-71(Poster)
桑畑和明、小野頌太、桑原理一、大野かおる

13. レーザ三次元粉末積層造形法を用いた生体用低磁性 Zr-Mo 合金の作製……………777
平成 27 年粉体粉末冶金協会春季大会
早稲田大学 国際会議場(2015.5.26-28) No.3-19A (Oral)
百瀬樹、加藤優典、菊池圭子、野村直之、川崎亮
14. ファイバーレーザを用いた Ti 合金粉末直接加熱におよぼす粉末粒径の影響 ……778
平成 27 年粉体粉末冶金協会春季大会
早稲田大学 国際会議場(2015.5.26-28) No.3-22A (Oral)
加藤優典、百瀬樹、菊池圭子、野村直之、川崎亮、尾崎智道、
佐藤彰洋
15. 太陽電池用モノライク Si 成長中の結晶方位と応力の関係 ……………779
次世代の太陽光発電システム第 175 委員会 第 12 回 「次世代の太陽光発
電システム」シンポジウム
郡山市 華の湯(2015.5.28-29) (Poster)
杉岡翔太、沓掛健太郎、出浦桃子、大野裕、米永一郎
16. レッジ構造を考慮したフェーズフィールド法による MoSi₂ 基 C11_b/D8_m
ラビリンス組織形成の研究 ……………781
第 129 回金属材料研究所講演会
東北大学 金属材料研究所(2015.5.29) (Oral)
山崎敏広、小泉雄一郎、千葉晶彦、萩原幸司、中野貴由、弓削是貴、
岸田恭輔、乾晴行
17. First-principles study of oxidation and chromium alloying effects on mechanical
properties in magnetite ……………782
平成 27 年度第 1 回 CMRI 研究会「腐食問題および構造材料の解明と設計の
ための大規模計算科学の課題」
東北大学(2015.6.22-23) (Oral)
Ying Chen
18. 磁石内部の磁化反転過程における反磁場の効果……………783
第 39 回日本磁気学会学術講演
名古屋大学 東山キャンパス(2015.9.8-11) No.9pB-6 (Oral)
塚原宙、井波暢人、岩野薫、三俣千春、小野寛太

19. 強誘電体薄膜キャパシタの分子動力学シミュレーション……………784
第 76 回応用物理学会秋季学術講演会
名古屋市 名古屋国際会議場(2015.9.13-16) No.14p-4F-2 (Oral)
西松毅、Umesh V. Waghmare、久保百司
20. Fe/TiC 整合界面の局所エネルギー・局所応力の第一原理解析……………785
日本金属学会 2015 年第 157 回秋期講演大会
九州大学 伊都キャンパス(2015.9.16-18)No.142 (Oral)
Sharma Vikas、香山正憲、田中真悟、椎原良典
21. レッジ構造を考慮したフェーズフィールド法による $\text{MoSi}_2/\text{Mo}_5\text{Si}_3$ 組織形成の
研究……………786
日本金属学会 2015 年第 157 回秋期講演大会 -シンポジウム 金属間化合物
材料の新たな可能性-
九州大学 伊都キャンパス(2015.9.16-18) No.S2-8 (Symposium)
山崎敏広、小泉雄一郎、千葉晶彦、萩原幸司、中野貴由、弓削是貴、
岸田恭輔、乾晴行
22. α 鉄における Cr-N 溶質原子複合体形成……………787
日本鉄鋼協会第 170 回秋期講演大会
九州大学 伊都キャンパス(2015.9.16-18) No.214 (Oral)
原彰人、SOUISSI Maaouia、沼倉宏
23. α 鉄中のバナジウムと炭素の原子間相互作用……………788
日本鉄鋼協会第 170 回秋期講演大会
九州大学 伊都キャンパス(2015.9.16-18) No.PS-73 (Poster)
松岡厚志、沼倉宏
24. 界面磁性の電界効果: 第一原理計算……………789
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学 千里山キャンパス(2015.9.16-19) No.17pCB-7 (Invited)
中村浩次

25. 強誘電体薄膜キャパシタのヒステリシスループの温度・膜厚・電極依存性 …791
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学 千里山キャンパス(2015.9.16-19) No.17pAD-12 (Oral)
西松毅、Umesh V. Waghmare、久保百司
26. 希土類金属超薄膜における結晶磁気異方性の理論的予測 ……792
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学 千里山キャンパス(2015.9.16-19) No.19aCG-10 (Oral)
池浦雄志、名和憲嗣、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳
27. 遷移金属酸化物における有効オンサイトクーロン相互作用：
拘束密度汎関数理論による再考 ……793
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学 千里山キャンパス(2015.9.16-19) No.19pCM-7 (Oral)
名和憲嗣、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳
28. 液体界面の計算分子科学 ……794
第 9 回分子科学討論会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2015.9.16-19) No.1E11 (Invited)
森田明弘
29. α 鉄中の固溶 C, N 原子と置換型溶質原子の相互作用 ……796
日本鉄鋼協会 材料の組織と特性部会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素 – 解明すべき課題」
九州大学 伊都キャンパス(2015.9.18) (Symposium)
ソイシ マオウイア、沼倉宏、陳迎、マーセル H. F. スライター
30. Fe/TiC 界面の局所エネルギー・局所応力の第一原理解析 ……799
日本機械学会第 28 回計算力学講演会
横浜国立大学(2015.10.10-12) (Oral)
香山正憲、Vikas Sharma、田中真悟、椎原良典
31. ハイエントロピー合金の熱膨張係数および体積弾性率の温度依存性の計算 …801
合金状態図第 172 委員会
札幌市(2015.10.23) (Oral)
東村基行、毛利哲夫、吉見享祐、葉安洲

32. 太陽電池用モノライク Si の結晶品質向上のための有限要素応力解析 ……………809
応用物理学会結晶工学分科会 第4回結晶工学未来塾「大学院生のキャリア
デザインを考えるー結晶工学研究者が社会で活躍するためにー」&研究ポ
スター発表会
東京農工大学 小金井キャンパス(2015.10.29) (poster)
杉岡翔太、沓掛健太郎、出浦桃子、大野裕、米永一郎
33. 第一原理クラスター変分法による Ni₃Al の熱膨張係数および体積弾性率の
温度依存性のシミュレーション ……………810
耐熱金属材料第 123 委員会
東京 (2015.11.9) (Oral)
東村基行、吉見享祐、毛利哲夫
34. 球形金属粒子の充填シミュレーション……………820
粉体粉末冶金協会 平成 27 年秋季大会
京都大学 百周年時計台記念館(2015.11.11-12) No.2-41A (Oral)
菊池圭子、野村直之、川崎亮
35. リチウム空気電池におけるリチウム酸化物の生成・分解メカニズムの
理論的解明 ……………821
第 56 回電池討論会
名古屋市 愛知県産業労働センター ウィンクあいち(2015.11.11-13)
No.2G08 (Oral)
鄭善鎬、赤木和人
36. 金属・半導体中の陽電子ー単空孔相互作用に関わる 2 成分 DFT 計算……………822
京都大学原子炉実験所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」
京都大学 原子炉実験所事務棟大会議室(2015.11.26-27)
石橋章司
37. 粗視化モデルを用いたポリエチレンにおけるラメラ構造の
破壊シミュレーション……………823
第 29 回分子シミュレーション討論会
新潟市 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター) (2015.11.30-2015.12.2)
No.201S (Oral)
樋口祐次、久保百司

38. 分子動力学法による固体酸化物形燃料電池の燃料極におけるニッケル粒子の
シンタリング及び劣化の検討825
第 29 回分子シミュレーション討論会
新潟市 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター) (2015.11.30-2015.12.2)
No.318S (Oral)
許競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司
39. バイオマス利用に向けた酵素反応解析827
第 6 回 CMSI 研究会 (HPCI 戦略プログラム分野 2 最終報告会)
東京大学 小柴ホール(2015.12.7-8) (Invited)
谷本勝一、東雅大、吉田紀生、中野晴之
40. ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルと
ダイナミクス828
第 6 回 CMSI 研究会 (HPCI 戦略プログラム分野 2 最終報告会)
東京大学 小柴ホール(2015.12.7-8) (Oral)
大野かおる、小野頌太、佐原亮二、野口良史
41. Derivation of first principles phase field crystal model829
第 6 回 CMSI 研究会 (HPCI 戦略プログラム分野 2 最終報告会)
東京大学 小柴ホール(2015.12.7-8) No.P-45(Poster)
Swastibrata Bhattacharyya, Kaoru Ohno, and Ryoji Sahara
42. Properties of solid-liquid interface of Al-Cu alloys by molecular dynamics simulation830
第 6 回 CMSI 研究会 (HPCI 戦略プログラム分野 2 最終報告会)
東京大学 小柴ホール(2015.12.7-8) No.P-46 (Poster)
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno,
Tomohiro Takaki
43. Phase Stability of the Binary Systems Presenting in the Multicomponent Phase in
Nd-Fe-B Permanent Magnet831
ESICMM 第 8 回磁性材料研究拠点成果報告会
TKP Garden City Sendai(2015.12.11-12) (Poster)
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto

44. 少数不純物粒子を含む斥力コロイド一層膜の凝固過程の計算機実験 ……………832
第5回ソフトマター研究会
東北大学 理学研究科(2015.12.17-19) No.PD-7 (Poster)
寺田弥生

<2016年>

1. 第一原理計算による Ba で置換したビーライトの構造特性の解析 ……………833
土木学会東北支部 平成27年度技術研究発表会
岩手大学 上田キャンパス(2016.3.5) No.V-26 (Oral)
桜田良治, 川添良幸, 鶴澤正美, 細川佳史, Abhishek Kumar Singh
2. プロトネーションと生体分子機能の予測:理論的アプローチ……………835
2015年度第2回水和ナノ構造研究会
仙台市 秋保温泉(2016.3.7) (Invited)
吉田紀生
3. 坩堝内成長で得られる太陽電池用 Si 結晶中の粒界が応力集中に与える影響…………836
第7回薄膜太陽電池セミナー
山形大学 工学部未来ホール(2016.3.13-15) No.P12 (Poster)
杉岡翔太、沓掛健太郎、出浦桃子、大野裕、米永一郎
4. 太陽電池用多結晶 Si の粒界での応力集中 ……………837
第63回応用物理学会 2016年春季学術講演会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2016.3.19-22) No.20p-S611-8 (Oral)
杉岡翔太、沓掛健太郎、出浦桃子、大野裕、米永一郎
5. カゴメ格子反強磁性体のスピンギャップ問題……………838
日本物理学会第71回年次大会
東北学院大学 泉キャンパス(2016.3.19-22) No.19pAU-10(Oral)
坂井徹、中野博生
6. 数値対角化法による歪んだ正方カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の
磁化ジャンプ……………839
日本物理学会第71回年次大会
東北学院大学 泉キャンパス(2016.3.19-22) No.19pAU-12 (Oral)
中野博生、長谷川泰正、坂井徹

7. 電荷のランダムネスを取り入れたリラクサーの分子動力学シミュレーション…840
日本物理学会第 71 回年次大会
東北学院大学 泉キャンパス(2016.3.19-22) No.21pAF-01 (Oral)
西松毅、Umesh V. Waghmare、久保百司
8. Fe/TiC 整合界面の局所エネルギー・局所応力の第一原理解析……………841
日本物理学会第 71 回年次大会
東北学院大学 泉キャンパス(2015.3.19-22)No.22aAQ-5(Oral)
Vikas Sharma、香山正憲、田中真悟、椎原良典
9. ノンコリニア磁気構造を考慮した L1₀FePt のバンド計算……………842
日本物理学会第 71 回年次大会
東北学院大学 泉キャンパス (2016.3.19-22) No.19aPS-3 (Poster)
上林一彦
10. INTERACTION OF INTERSTITIAL C WITH SUBSTITUTIONAL Cr IN ALPHA
IRON: A FIRST-PRINCIPLES STUDY …………… 843
日本金属学会春期講演大会(第 158 回)
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.23-25) No.389 (Oral)
Maaouia Souissi, Ying Chen, Marcel H. F. Sluiter, Hiroshi Numakura
11. 電子照射下における鉄の空孔の非熱的移動過程の分子動力学計算……………844
日本金属学会春期講演大会(第 158 回)
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.23-25) No.456 (Oral)
佐藤裕樹、五月女貴平、阿部弘亨、松川義孝、叶野翔
12. 電子照射に誘起される銅中の空孔移動の分子動力学シミュレーション……………845
日本金属学会春期講演大会(第 158 回)
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.23-25) No.P11 (Poster)
五月女貴平、佐藤裕樹、阿部弘亨、松川義孝、叶野翔

13. 第一原理計算及びクラスター変分法を用いた Ni_3Al の熱膨張係数および
体積弾性率の温度依存性の評価846
日本金属学会春期講演大会 (第 158 回)
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.23-25) No.P122 (Poster)
東村基行、吉見享祐、毛利哲夫
14. 塑性加工された Fe-Cr-Co 磁石合金におけるスピノーダル分解847
日本鉄鋼協会第 171 回春季講演大会
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.23-25) No.184 (Oral)
小泉雄一郎、祝迫ひとみ、千葉晶彦、大沼学、操谷欽吾
15. 鉄中の B, C, N の挙動-取り組むべき課題848
日本鉄鋼協会 材料の組織と特性部会シンポジウム「鉄鋼中の軽元素-基礎,
組織形成, 力学特性」
東京理科大学 葛飾キャンパス(2016.3.24) (Symposium)
沼倉宏

V. 新聞記事

<2015年>

1. クロムに7水素結合 成功 東北大 超電導材への可能性も
日刊工業新聞 (2015.4.3)
2. クロムに7つの水素を結合 ハイドライド・ギャップ克服 東北大などの研究グループが新たな水素化合物合成
科学新聞 (2015.4.10)

VI. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員851
2. 東北大学金属材料研究所構内図852
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図853