

2016 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

(2016 年 4 月～2017 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. 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 …1
物質・材料研究機構 佐原亮二、Bhattacharya Somesh Kumar
Korea Institute of Science and Technology 水関博志、Choi Keunsu
山梨大学 根城均
2. 核融合炉タンクステンダイバータ板の熱挙動解析 ……………3
九州大学応用力学研究所 徳永和俊
九州大学総合理工学府 浮田天志、尾崎浩詔
東北大学金属材料研究所 佐藤裕樹
3. 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 ……………6
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる
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
岐阜大学工学部 小野頌太
物質・材料研究機構 野田祐輔
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov

4. 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 …… 10
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
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 …… 15
大阪府立大学工学研究科 沼倉宏、Souissi Maaouia
6. 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 …… 19
秋田工業高等専門学校 上林一彦
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 …… 20
秋田工業高等専門学校 桜田良治
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
日本大学 鶴澤正美
太平洋セメント(株) 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. 第一原理計算を用いた酸窒化物の強誘電性発現機構の解明 …… 22
東京大学理学系研究科 毛司辰、小泉透、神坂英幸、長谷川哲也
9. ニコチンアミドのテラヘルツスペクトルの温度依存性の第一原理計算による
解析 …… 27
東北大学農学研究科 高橋まさえ
10. 非平衡材料のトポロジカルデータ解析と第一原理計算 …… 31
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 藤田武志
11. 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 …… 36
東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
12. 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 …… 39
東北大学多元物質科学研究所 中村崇
13. 3次元積層造形法における熱伝導シミュレーション …… 45
東北大学工学研究科 菊池圭子

14. First-principles study of physical properties of Fe-based alloy and relevant materials ··· 49
 School of Engineering, Tohoku University, Japan Ying Chen,
 Arkapol Saengdeejing, Hubin Luo, Jan-Michael Albina
 Institute of Fluid Physics, China Hua Y. Geng
 Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS, China
 Hubin Luo
 ICAMS, Ruhr-Universität Bochum, Germany Jan-Michael Albina
15. 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······ 54
 東北大学金属材料研究所 横田有為
16. First principles calculations of hydrogen interaction with a vacancy containing bulk
 nickel ····· 56
 New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University
 Nishith K. Das, Tetsuo Shoji
17. THEORETICAL DESCRIPTION OF STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP OF
 FUNCTIONAL NANOPOROUS MATERIALS BASED ON ACCURATE
 ESTIMATION OF GUEST-HOST INTERACTION······ 61
 Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov
18. 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······ 66
 東北大学金属材料研究所 佐藤裕樹、松川義孝、五月女貴平、西村憲治、
 阿部弘亨、叶野翔、趙子寿
19. マルチスケールアプローチによる相変態と材料物性の解明······ 68
 東北大学金属材料研究所 寺田弥生、Jean-Claude Crivello,
 Sankar Deb Nath, Bourgeois Natacha
 ICMPE, France Jean-Claude Crivello, Bourgeois Natacha
 東北大学工学研究科 東村基行

20. 相安定性・相平衡・相変態の統計熱力学…………… 73
東北大学金属材料研究所 毛利哲夫
東北大学工学研究科 山田泰徳
Inst. of Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia Ivan Stich, Brndiar Jan
WIGNER Research Centre for Physics, Hungary Laszlo Granasy
IISER, India Ghosh Prasenjit, Kabir Mukul
静岡大学 星野敏春、劉暢、Abed Al Hasan
21. イオン半径の違いによる不均一歪みを取り入れた(Ba,Sr)TiO₃の分子動力学
シミュレーション…………… 79
東北大学金属材料研究所 西松毅
University of Duisburg-Essen, Germany Anna Grünebohm
22. 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… 81
東北大学金属材料研究所 大谷優介、許競翔、桑原卓哉、樋口祐次、
尾澤伸樹、久保百司
23. 原子炉用核燃料における酸素空孔のナノ解析…………… 86
東北大学金属材料研究所 小無健司、八登唯夫、富田祐美恵
24. 水素化物における機能性探索のための計算材料科学…………… 89
東北大学金属材料研究所 高木成幸、池庄司民夫、佐藤豊人、折茂慎一
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 折茂慎一
25. 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 …… 92
東北大学金属材料研究所 西嶋雅彦
26. 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… 94
東北大学金属材料研究所 小泉雄一郎、千葉晶彦
(株)プロスパイン 立谷雄一、大沼学、操谷欽吾
27. 近似結晶マッカイクラスタ構造と空間配列構造…………… 97
東北大学金属材料研究所 志村玲子

28. 汚染水除去抽出システム開発のための共抽出錯体の構造最適化 98
東北大学金属材料研究所 山村朝雄、白崎謙次、永井満家、高橋晃
29. 電解質複合材料の粗視化モデルによる研究 102
東北大学金属材料研究所 芝隼人、彭海龙
30. 高信頼性構造材料 104
産業技術総合研究所 香山正憲、田中真悟、石橋章司
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる
岐阜大学工学部 小野太
物質・材料研究機構 佐原亮二
31. 電荷秩序状態近傍で観測される相分離・ガラス現象における電子状態の解析 .. 110
東京大学物性研究所 吉見一慶、加藤岳生
32. 有機導体 dmit 塩に対する第一原理有効モデルの有限温度解析 113
東京大学物性研究所 三澤貴宏

II. 原著論文

<2016 年>

1. First-principles Study of Stability of Cu in the Nd-rich and Nd Oxide Phases of Nd-Fe-B Permanent Magnet 117
J. Chin. Chem. Soc., 63[6] (2016) pp.506-512
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimoto
2. First-Principles Study of the Effect of Trace Impurity on Initial Water Adsorption onto Belite 124
J. Civil Eng. Architect. Res., 3[12] (2016) pp.1826-1832
Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Syun-ichiro Uchida, Yoshiyuki Kawazoe, Aaditya Manjanath and Abhishek Kumar Singh
3. Correlated structural and electronic phase transformations in transition 130
J. Appl. Phys., 119[13] (2016) pp.1359011-1359017
Chunyu Li, Feng Ke, Qingyang Hu, Zhenhai Yu, Jinggeng Zhao, Zhiqiang Chen and Hao Yan
4. Crystal structure and transporting properties of Bi₂S₃ under high pressure: Experimental and theoretical studies 137
J. Alloys Compd., 688[Part A] (2016) pp.329-335
Chunyu Li, Jinggeng Zhao, Qingyang Hu, Zhiguo Liu, Zhenhai Yu and Hao Yan
5. Pressure-Induced Bandgap Optimization in Lead-Based Perovskites with Prolonged Carrier Lifetime and Ambient Retainability 144
Adv. Funct. Mater., 27[3] (2016) pp.16042081-16042088
Gang Liu, Lingping Kong, Jue Gong, Wenge Yang, Ho-kwang Mao, Qingyang Hu, Zhenxian Liu, Richard D. Schaller, Dongzhou Zhang and Tao Xu
6. Vacancy effects on one-dimensional migration of interstitial clusters in iron under electron irradiation at low temperatures 152
Philos. Mag., 96[21] (2016) pp.2219-2242
Y. Satoh, Y. Abe, H. Abe, Y. Matsukawa, S. Kano, S. Ohnuki and N. Hashimoto

7. GW + Bethe-Salpeter Equation Approach for Photoabsorption Spectra: Importance of Self-Consistent GW Calculations in Small Atomic Systems 176
 Phys. Rev. B, 94[12] (2016) pp.1211161-1211165
 Riichi Kuwahara, Yoshifumi Noguchi and Kaoru Ohno

8. A Self-consistent GW approach to the van der Waals potential for a helium dimer..... 181
 Phys. Chem. Chem. Phys., 18[35] (2016) pp.24477-24483
 Toru Shoji, Riichi Kuwahara, Shota Ono and Kaoru Ohno

9. *Ab initio* molecular dynamics simulation study of successive hydrogenation reactions of carbon monoxide producing methanol 188
 J. Chem. Phys., 144[14] (2016) pp.1443091-1443096
 Thi Nu Pham, Shota Ono and Kaoru Ohno

10. All-electron mixed basis *GW* calculations of TiO₂ and ZnO crystals 194
 Phys. Rev. B, 93[15] (2016) pp.1551161-1551169
 Ming Zhang, Shota Ono, Naoki Nagatsuka and Kaoru Ohno

11. Molecular Dynamics Simulations of Chemically Disordered Ferroelectric (Ba,Sr)TiO₃ with a Semi-Empirical Effective Hamiltonian 203
 J. Phys. Soc. Jpn., 85 (2016) pp.1147141-1147145
 Takeshi Nishimatsu, Anna Grünebohm, Umesh V. Waghmare and Momoji Kubo

12. Adjusting band gap and charge transfer of organometallic complex adsorbed on MoS₂ monolayer using vertical electric-field: a first-principles investigation 208
 J. Phys.: Condens. Matter, 29[1] (2016) pp.01500301-01500313
 Viet Q Bui, Hung M Le, Yoshiyuki Kawazoe and Yongho Kim

13. *Ab initio* characterization of B, C, N, and O in bcc iron: Solution and migration energies and elastic strain fields 221
 Comp. Mater. Sci., 124 (2016) pp.249-258
 Maaouia Souissi, Ying Chen, Marcel H. F. Sluiter and Hiroshi Numakura

14. Growth of Graphene Nanocoil in a SiC Container: A Molecular Dynamics Study231
 Adv. Mater. Phys. Chem., 6 (2016) pp.113-119
 Swastibrata Bhattacharyya, Shotaro Otake, Shota Ono, Riichi Kuwahara
 and Kaoru Ohno
15. Relationship between cap structure and energy gap in capped carbon nanotubes238
 J. Chem. Phys., 145[2] (2016) pp.0247021-0247026
 Shota Ono, Kousei Tanikawa, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
16. Extending the applicability of the Goldschmidt tolerance factor to arbitrary ionic
 compounds244
 Sci. Rep., 6 (2016) pp.2359201-2359210
 Toyoto Sato, Shigeyuki Takagi, Stefano Deledda, Bjørn C. Hauback
 and Shin-ichi Orimo
17. Investigation on the crystallization mechanism difference between FINEMET[®] and
 NANOMET[®] type Fe-based soft magnetic amorphous alloys254
 J. Appl. Phys., 120[14] (2016) pp.1451021-1451026
 Yaocen Wang, Yan Zhang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino
 and Yoshiyuki Kawazoe
18. Simulation on Thermocapillary-Driven Drop Coalescence by Hybrid Lattice Boltzmann
 Method260
 Microgravity Sci. Technol., 28[1] (2016) pp.67-77
 Haiqiong Xie, Zhong Zeng, Liangqi Zhang, Yuui Yokota, Yoshiyuki Kawazoe
 and Akira Yoshikawa
19. Tuning Up an Electronic Structure of the Subphthalocyanine Derivatives toward
 Electron-Transfer Process in Noncovalent Complexes with C₆₀ and C₇₀ Fullerenes:
 Experimental and Theoretical Studies271
 Inorg. Chem, 55[19] (2016) pp.9549-9563
 Hannah M. Rhoda, Mathew P. Kayser, Yefeng Wang, Alexander Y. Nazarenko,
 Rodion V. Belosludov, Paul Kiprof, David A. Blank and Victor N. Nemykin

20. Conceptual design of tetraazaporphyrin- and subtetraazaporphyrin-based functional nanocarbon materials: electronic structures, topologies, optical properties, and methane storage capacities286
 Phys.Chem.Chem.Phys., 18[19] (2016) pp.13503-13518
 Rodion V. Belosludov, Hannah M. Rhoda, Ravil K. Zhdanov,
 Vladimir R. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe and Victor N. Nemykin
21. Hydrogen hydrates: Equation of state and self-preservation effect 302
 Fluid Phase Equilib. , 413 (2016) pp.220-228
 Rodion V. Belosludov, Yulia Yu. Bozhko, Ravil K. Zhdanov, Oleg S. Subbotin,
 Yoshiyuki Kawazoe and Vladimir R. Belosludov
22. Initial Report on Molecular and Electronic Structure of Spherical Multiferrocenyl/tin(IV) (Hydr)oxide [(FcSn)₁₂O₁₄(OH)₆]X₂ Clusters 311
 Cryst. Growth Des. , 16[2] (2016) pp.1027-1037
 Pavlo V. Solntsev, Derrick R. Anderson, Hannah M. Rhoda,
 Rodion V. Belosludov, Mahtab Fathi-Rasekh, Eranda Maligaspe,
 Nikolay N. Gerasimchuk and Victor N. Nemykin
23. Approximate solutions to the cluster variation free energies by the variable basis cluster expansion 322
 Comput. Mater. Sci, 122 (2016) pp.301-306
 J. M. Sanchez and T. Mohri
24. Predicted reentrant melting of dense hydrogen at ultra-high pressures 328
 Sci. Rep., 6 (2016) pp.367451-367457
 Hua Y. Geng and Q. Wu
25. Dirac cone move and bandgap on/off switching of graphene superlattice 335
 Sci. Rep., 6 (2016) pp.1886901-1886911
 Tian-Tian Jia, Meng-Meng Zheng, Xin-Yu Fan, Yan Su, Shu-Juan Li,
 Hai-Ying Liu, Gang Chen and Yoshiyuki Kawazoe
26. Hidden electronic rule in the “cluster-plus-glue-atom” model 346
 Sci. Rep., 6 (2016) pp.3367201-3367211
 Jinglian Du, Chuang Dong, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe and Bin Wen

27. First-principles modeling of 3*d*-transition-metal-atom adsorption on silicene: a linear-response DFT + *U* approach357
J. Phys.: Condens. Matter , 28[13] (2016) pp.13530101-13530111
Hung M Le, Tan-Tien Pham, Thach S Dinh, Yoshiyuki Kawazoe
and Duc Nguyen-Manh

<2017 年>

1. Dehydrogenation of goethite in Earth's deep lower mantle·····368
PNAS, 114[7] (2017) pp.1498-1501
Qingyang Hu, Duck Young Kim, Jin Liu, Yue Meng, Liuxiang Yang,
Dongzhou Zhang, Wendy L. Mao and Ho-kwang Mao
2. Athermal migration of vacancies in iron and copper induced by electron irradiation ··372
Philos. Mag., 97[9] (2017) pp.638-656
Y. Satoh, T. Sohtome, H. Abe, Y. Matsukawa and S. Kano
3. A simple derivation of the exact quasiparticle theory and its extension to arbitrary initial
excited eigenstates ······391
J. Chem. Phys., 146[8] (2017) pp.08410801-08410815
Kaoru Ohno, Shota Ono and Tomoharu Isobe
4. Temperature Dependence in the Terahertz Spectrum of Nicotinamide: Anharmonicity and
Hydrogen-Bonded Network ······406
J. Phys. Chem. A, 121[13] (2017) pp.2558-2564
Masae Takahashi, Nubuyuki Okamura, Xinyi Fan, Hitoshi Shirakawa
and Hiroaki Minamide
5. Stability limits and transformation pathways of α -quartz under high pressure ······413
Phys. Rev. B, 95[10] (2017) pp.10411201-10411210
Q. Y. Hu, J. -F. Shu, W. G. Yang, C. Park, M. W. Chen, T. Fujita, H. -K. Mao
and H. W. Sheng
6. Fast sodium ionic conduction in $\text{Na}_2\text{B}_{10}\text{H}_{10}$ - $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ pseudo-binary complex hydride
and application to a bulk-type all-solid-state battery ······423
Appl. Phys. Lett., 110[10] (2017) pp.1039011-1039015
Koji Yoshida, Toyoto Sato, Atsushi Unemoto, Motoaki Matsuo, Tamio Ikeshoji,
Terrence J. Udovic and Shin-ichi Orimo

7. Infrared Spectroscopic and Computational Studies on Li_4FeH_6 with High Gravimetric Hydrogen Density428
Mater. Tran., 58[2] (2017) pp.157-159
Takahiro Ogata, Toyoto Sato, Shigeyuki Takagi, Hiroyuki Saitoh, Yuki Iijima,
Biswajit Paik and Shin-ichi Orimo

8. Formation of novel transition metal hydride complexes with ninefold hydrogen coordination431
Sci. Rep., 7 (2017) pp.442531-442538
Shigeyuki Takagi, Yuki Iijima, Toyoto Sato, Hiroyuki Saitoh, Kazutaka Ikeda,
Toshiya Otomo, Kazutoshi Miwa, Tamio Ikeshoji and Shin-ichi Orimo

9. Cluster Variation Method as a Theoretical Tool for the Study of Phase Transformation ...439
Metall. Mater. Trans. A, 48[6] (2017) pp.2753-2770
Tetsuo Mohri

10. Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian457
npj Comput. Mater., 3 (2017)
Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata,
Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda,
Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka

11. B2-disorder phase boundary calculations in Fe rich region of Fe-Si binary system with tetrahedron approximation of CVM471
Calphad, 56 (2017) pp.207-214
Naoya Kiyokane, Ying Chen, Takako Yamashita, Masayasu Nagoshi,
Takaaki Iguchi and Tetsuo Mohri

12. Magnetization reversal processes of isotropic permanent magnets with various inter-grain exchange interactions479
AIP Adv., 7[5] (2017) pp.0562241-0562244
Hiroshi Tsukahara, Kaoru Iwano, Chiharu Mitsumata, Tadashi Ishikawa
and Kanta Ono

III. 国際会議発表論文

< Proceeding >

1. FIRST-PRINCIPLES STUDY OF ATOMIC HYDROGEN AND OXYGEN ADSORPTION ON DOPED-IRON NANOCLUSTERS483
Proceedings of The 24th International Conference on Nuclear Engineering, (2016), pp.605161-605166
The 24th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE24)
Nishith K. Das and T. Shoji

2. Kinetics and interfacial free energy of the solid-liquid interface of Al-Cu alloys by molecular dynamics simulations489
Proceedings of The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, (2016), pp.179-183
The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9)
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki and Tetsuo Mohri

3. A First Principles Study of phase Stability and Structural Properties in $(\text{Fe,Cr})_{23}(\text{C,B})_6$ Compounds494
Proceedings of The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, (2016), pp.919-921
The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9)
Ryoji Sahara, Tetsuya Matsunaga, Hiromichi Hongo and Masaaki Tabuchi

<2016 年>

1. THEORETICAL STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES OF ATOM/MOLECULE STRUCTURES DEPOSITED ON VARIOUS SURFACES·····497
4th Seminar dedicated to the memory of Professor Fedor Kuznetsov: Problems of chemical deposition from the gas phase
Novosibirsk, Russia (2016.2.1)
R. V. Belosludov

2. Hydrogen bonding network between molecules detected with terahertz spectroscopy ···498
EMN Meeting on Terahertz 2016
San Sebastián, Spain (2016.5.14-18) No.D26 (Invited)
Masae Takahashi

3. Microstructure formation in MoSi₂/Mo₅Si₃ alloy containing structural ledge ······499
Summit of Materials Science 2016(SMS2016)
Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.5.18-20) No.P23 (Poster)
T. Yamazaki, Y. Koizumi, A. Chiba, K. Yuge, K. Kishida and H. Inui

4. Approximate Solutions to the Cluster Variation Free Energies by the Variable Basis Cluster Expansion ············500
The 45th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD XLV)
Awaji Island, Hyogo, Japan (2016.5.29-3) No.O4 (Oral)
J. M. Sanchez and T. Mohri

5. Describing the Laves phases using a cluster expansion description···········501
The 45th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD XLV)
Awaji Island, Hyogo, Japan (2016.5.29-3) (Oral)
J. -C. Crivello, T. Mohri and J. -M. Joubert

6. Ab initio evaluation of the enthalpy of solution of light elements in bcc iron 502
 The 45th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD XLV)
 Awaji Island, Hyogo, Japan (2016.5.29-3) No.PA49 (Poster)
 M. Souissi, Y. Chen, M. H. F. Sluiter and H. Numakura

7. Cluster Expansion Study of the Binary System in Multicomponent Nd-F-B Permanent Magnet System 503
 The 45th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD XLV)
 Awaji Island, Hyogo, Japan (2016.5.29-3) No.O14 (Oral)
 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimoto

8. Phase diagrams of Ni-H and Pd-H systems using ab-initio based Cluster Variation Method and Monte-Carlo simulation 504
 The 45th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD XLV)
 Awaji Island, Hyogo, Japan (2016.5.29-3) No.O31 (Oral)
 Natacha Bourgeois, Pierre Cenedese, Jean-Claude Crivello,
 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen and Jean-Marc Joubert

9. Surface modification of tungsten materials by non-steady state repeated high heat loading and elastic-plastic thermal stress analyses 505
 22th International Conference on Plasma Surface Interactions in Controlled Fusion Devices
 Rome, Italy (2016.5.30-3) No.P2.77 (Poster)
 K. Tokunaga, T. Ukita, K. Araki, T. Fujiwara, Y. Miyamoto, M. Hasegawa,
 K. Nakamura, H. Kurishita and S. Matsuo

10. Effects of dopant distribution improvement on Optical and Scintillation Properties for Ce-doped garnet-type Scintillator Single Crystals 506
 7th International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications 2016 (ICOOPMA2016)
 Montréal, Québec, Canada (2016.6.13-17) No.Th-C3-O3 (Oral)
 Yuui Yokota, Tetsuo Kudo, Yuji Ohashi, Shunsuke Kurosawa, Kei Kamada and Akira Yoshikawa

11. Atomistic level description of amorphous solids: Structural, dynamic and thermodynamic properties 507
 23rd International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2016)
 Nara, Japan (2016.7.3-8) No.I2 (Invited)
 Rodion Belosludov
12. Interaction between interstitial and substitutional solute atoms in alpha iron: experimental study 508
 The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9)
 Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan (2016.8.1-5) (Oral)
 H. Numakura, R. Nakamura and M. Souissi
13. Interaction between interstitial and substitutional solute atoms in alpha iron: first-principles study 509
 The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9)
 Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan (2016.8.1-5) (Oral)
 M. Souissi, Y. Chen, M. H. F. Sluiter and H. Numakura
14. Modeling of the substitutional disorder in AB_2 Laves phases 510
 The 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM9)
 Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan (2016.8.1-5) (Oral)
 J. -C. Crivello, J. -M. Joubert and T. Mohri
15. NANOPOROUS MATERIALS FOR GAS STORAGE AND SEPARATION: THEORETICAL ASPECTS 511
 252th ACS National Meeting
 Philadelphia, PA, USA (2016.8.21-25) No.ENFL.90 (Oral)
 R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

16. STRUCTURAL PROPERTIES OF BELITE DOPED BY TWO KINDS OF TRACE IMPURITIES512
 41st Conference on Our World in Concrete and Structures
 Furama City Centre, Singapore (2016.8.25-26) No.41 (Invited)
 R. Sakurada, M. Uzawa, Y. Hosokawa, Y. Kawazoe and A. K. Singh
17. First principles calculation and thermodynamic modelling of metal-hydrogen systems ...520
 The Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys (TOFA 2016)
 Santos, Brazil (2016.9.4-9) No.O26 (Oral)
 Joubert J., Crivello J. and Bourgeois N.
18. ANALYSIS OF FREE ENERGY CALCULATION OF THE ALLOY SYSTEM: FE-SI AS AN EXAMPLE 521
 The Discussion Meeting on Thermodynamics of Alloys (TOFA 2016)
 Santos, Brazil (2016.9.4-9) No.O27 (Oral)
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing and Tetsuo Mohri
19. Finite-Temperature Signatures of Spin Liquids in Frustrated Hubbard Model522
 Highly Frustrated Magnetism (HFM) 2016
 Taipei, Taiwan (2016.9.7-11) No.S0404 (Poster)
 T. Misawa and Y. Yamaji
20. First principles study of electronic structures and stability in structural materials523
 Asian Consortium on Computational Materials Science – Theme Meeting on First Principle Analysis & Experiment: Role in Energy Research (ACCMS-TM 2016)
 SRM University, Chennai, India (2016.9.22-24) No.19 (Invited)
 Ryoji Sahara

21. Physical and Electronic Properties of BMIM Ionic Liquids: A Combined Investigation using CMD and DFT 524
Asian Consortium on Computational Materials Science – Theme Meeting on First Principle Analysis & Experiment: Role in Energy Research (ACCMS-TM 2016)
SRM University, Chennai, India (2016.9.22-24) (Poster)
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
22. Effects of Parameters on Microstructure and Mechanical Properties of Cu-Cr Alloys Fabricated by Selective Laser Melting 525
10th International Conference on Trends in Welding Research
Hitotsubashi Hall, Tokyo, Japan (2016.10.11-14) No.S23-4 (Oral)
Keiko Kikuchi, Naoyuki Nomura, Takato Kousaka, Akira Kawasaki,
Shinichi Moriya, Takayuki Nakamoto and Takahiro Kimura
23. ROLE OF COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE IN REALIZATION OF ADVANCED ENERGY MATERIALS AND NANOSTRUCTURES 529
2016 Russia-Japan Conference Advanced materials: Synthesis, Processing and Properties of Nanostructures
Novosibirsk, Russia (2016.10.30-3) (Invited)
Rodion Belosludov
24. A computational study on early stage oxidation initiation mechanism of Ni-Cr (111), (110) and (100) surfaces 530
USTB-Tohoku U Joint Research Laboratory Inauguration Ceremony & Workshop
Beijing, China (2016.11.16-18)
Nishith K. Das and Tetsuo Shoji
25. Catalytic activity of nano-sized TiO₂ particles toward decomposition of ammonium perchlorate 531
The 2016 MRS Fall Meeting & Exhibit
Boston, Massachusetts, USA (2016.11.27-2) No.EC3.6.08 (Oral)
Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

26. Conceptual design and theoretical description of the tetraazaporphyrin-based functional nanocarbon materials 532
 The 2016 MRS Fall Meeting & Exhibit
 Boston, Massachusetts, USA (2016.11.27-2) No.NM3.7.26 (Oral)
 Rodion Belosludov, Hannah Rhoda, Victor Nemykin, Ravil Zhdanov,
 Vladimir Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
27. NEDO Project: Computer-Aided Materials Design of New Carbon Nanomaterials 533
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) (Introductory)
 Kaoru Ohno
28. Stability analysis of NdFe₁₂ series compounds as promising new high performance permanent magnetic materials 534
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.1 (Invited)
 Ying Chen and Arkapol Saengdeejing
29. Recent Development of TOMBO Ver. 2 535
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.8 (Invited)
 Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Yoshifumi Noguchi, Nu Thi Pham,
 Tomohiro Isobe, Tsubasa Aoki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
30. CLATHRATE HYDRATE FOR ENERGY STORAGE AND TRANSPORT 536
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.27 (Invited)
 R. V. Belosludov, R. K. Zhdanov, Yu. Yu. Bozhko, K. V. Gets, O. S. Subbotin,
 V. R. Belosludov and Y. Kawazoe

31. First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Materials Interfaces and Alloys537
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.36 (Invited)
 Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Shingo Tanaka
 and Yoshinori Shiihara
32. First principles study of electronic structures and stability in structural materials538
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.37 (Invited)
 Ryoji Sahara
33. First-principles study of stability of γ -Cr_{23-x}Fe_xC₆ precipitates: The effect of metal site occupancy539
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.15 (Oral)
 Maaouia Souissi, Ryoji Sahara, Marcel H. F. Sluiter, Tetsuya Matsunaga
 and Masaaki Tabuchi
34. Implementation of Spin-Orbit Coupling in TOMBO Code.....540
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.4 (Poster)
 Takeru Nakashima and Kaoru Ohno
35. Extension of hyperfine calculation to crystal systems in TOMBO Ver.2541
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.6 (Poster)
 Hiroyuki Terada and Kaoru Ohno

36. Calculation of the photo absorption spectra using the GW approximation for the ($N-1$)-electron system 542
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.7 (Poster)
 Tomoharu Isobe and Kaoru Ohno
37. First-principles calculations of core electron binding energies for insulators and semiconductors with the one-shot GW method 543
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.8 (Poster)
 Tsubasa Aoki and Kaoru Ohno
38. Energy conversion efficiency of organic photovoltaic cells: heterojunction of peanut-shaped fullerene polymer and zinc phthalocyanine 544
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.12 (Poster)
 Kousei Tanikawa, Yusuke Noda, Shota Ono and Kaoru Ohno
39. Stability of analysis of NdFe₁₂-based compounds as promising new high performance permanent magnet materials - Effect of Zr 545
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.16 (Poster)
 Arkapol Saengdeejing and Ying Chen
40. Adsorption Property of Water Molecule on Belite Surface 546
 11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
 -Virtual Organization
 Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.20 (Poster)
 Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Syun-ichiro Uchida,
 Yoshiyuki Kawazoe, Aaditya Manjanath and Abhishek Kumar Singh

41. Role of impurity in oxidation resistance of Ti: Ab initio DFT study547
11th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
-Virtual Organization
Tohoku University, Miyagi, Japan (2016.12.19-21) No.21 (Poster)
Somesh Kr. Bhattacharya, Ryoji Sahara, Tomonori Kitashima, Ayako Ikeda,
Kyosuke Ueda and Takayuki Narushima

<2017 年>

1. First-principles study of graphene-based materials as nanostructure adsorbent548
The 10th International Conference on Computational Physics (ICCP10)
Sands Cotai Central, Macao SAR, China (2017.1.16-20) No.A6-14 (Invited)
Hiroshi Mizuseki and Keunsu Choi

IV. 予稿集

<2016年>

1. レーザー積層造形法を用いた銅合金の組織と機械的性質に及ぼす造形パラメータの影響 549
平成 28 年粉体粉末冶金協会春季大会
京都工芸繊維大学 (2016.5.24-26) No.1-43A (Oral)
菊池圭子、野村直之、高坂天翔、森谷信一、中本貴之、木村貴広、川崎亮
2. 拡張準粒子方程式に基づく励起状態の計算の検証 550
ナノ学会第 14 回大会
福岡県北九州市 北九州国際会議場 (2016.6.14-16) No.1P-014 (Poster)
磯部智遥、小野頌太、大野かおる
3. Evaluation of Hydrogen Storage Capacity of Calix[4]arene Crystals using density functional theory 551
ナノ学会第 14 回大会
福岡県北九州市 北九州国際会議場 (2016.6.14-16) No.1P-049 (Poster)
V. J. Y. Surya, R. Sato, M. Yamada, F. Hamada and Y. Kawazoe
4. Estimation of melting point and kinetic coefficient of Al-Cu alloy by molecular dynamics simulation 552
第 1 回ポスト「京」重点課題(7)研究会
東京大学 本郷キャンパス (2016.7.21-22) (Poster)
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki and Tetsuo Mohri
5. フラストレートしたハバード模型における量子スピン液体の有限温度の性質について 553
物性研究所短期研究会パイ電子物性科学の最前線
東京大学 物性研究所 (2016.8.8-10) No.P30 (Poster)
三澤貴宏、山地洋平

6. Ginzburg-Landau 方程式を用いた電荷秩序近傍でのスローダイナミクスに関する理論解析554
 日本物理学会 2016 年秋季大会
 金沢大学 角間キャンパス (2016.9.13-16) No.14aPS-1 (Poster)
 吉見一慶、小西優祐、加藤岳生
7. 拡張準粒子方程式に基づく計算の検証555
 日本物理学会 2016 年秋季大会
 金沢大学 角間キャンパス (2016.9.13-16) No.16aPS-83 (Poster)
 磯部智遥、小野頌太、大野かおる
8. 金属間化合物研究におけるフェーズフィールド計算556
 日本金属学会 2016 年秋期(第 159 回)講演大会
 大阪大学 豊中キャンパス (2016.9.21-23) No.S1.34 (Keynote)
 小泉雄一郎
9. Interfacial free energy of Cu-Al alloys by atomistic simulations557
 日本金属学会 2016 年秋期(第 159 回)講演大会
 大阪大学 豊中キャンパス(2016.9.21-23) No.181 (Oral)
 Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki
 and Tetsuo Mohri
10. Fe 粒界への sp 元素偏析の第一原理局所エネルギー・局所応力解析558
 日本金属学会 2016 年秋期(第 159 回)講演大会
 大阪大学 豊中キャンパス(2016.9.21-23) No.411 (Oral)
 S. Kr. Bhattacharya、香山正憲、田中真悟、椎原良典
11. α 鉄における固溶 C と V の相互作用559
 日本鉄鋼協会第 172 回秋季講演大会
 大阪大学 豊中キャンパス (2016.9.21-23) No.188 (Oral)
 松岡厚志、沼倉宏
12. 鉄粒界の sp 元素偏析の第一原理局所エネルギー解析560
 日本機械学会第 29 回計算力学講演会
 名古屋大学 東山キャンパス (2016.9.22-24) No.237 (Oral)
 Somesh Kr. Bhattacharya、香山正憲、田中真悟、椎原良典

13. 第一原理分子動力学法による結晶性シリカ摩擦界面の構造と電子状態の解析……563
トライボロジー会議秋新潟
新潟県新潟市 朱鷺メッセ (2016.10.12-14) No.E12 (Oral)
大谷優介、高橋直己、久保百司
14. Fe 系材料の第一原理局所エネルギー・局所応力解析 ……………565
PCoMS シンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会
東北大学 片平キャンパス (2016.10.17-18) (Oral)
香山正憲、Vikas Sharma、Somesh Kr. Bhattacharya、田中真悟、椎原良典
15. 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 系合金の熱力学的諸特性……………566
合金状態図第 172 委員会・第 31 回委員会・研究会
茨城県つくば市 物質・材料研究機構 (2016.10.22) (Oral)
佐原亮二、長田俊郎、Swastibrata Bhattacharyya、大野かおる
16. 不規則形状粉末を用いた Ti 合金積層造形体の作製……………568
平成 28 年粉体粉末冶金協会秋季大会
東北大学 青葉山キャンパス (2016.11.9-11) No.2-51A (Oral)
加藤優典、孫小湊、菊池圭子、野村直之、川崎亮、高久茜、尾崎智道、
佐藤彰洋
17. DMAPS の THz スペクトルの温度依存性……………569
シンポジウム「テラヘルツ科学の最先端 III」
福井県坂井市 三国観光ホテル (2016.11.23-25) No.Pos26-AS (Poster)
菊池星、高橋まさえ、三膳真也、須藤駿、松井広志、森本展行
18. 大規模分子動力学法による固体酸化物形燃料電池における Ni 多結晶の破壊プロセスの検討……………570
第 30 回分子シミュレーション討論会
大阪大学 豊中キャンパス (2016.11.30-2) No.304S (Oral)
許競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司

19. Kinetic coefficients of Al-Cu alloys by molecular dynamics simulations572
第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) シンポジウム ~次世代の産
業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成~
東京大学 物性研究所 (2016.12.6-7) (Poster)
S. K. Deb Nath, Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki and T. Mohri
20. Segregation of *sp*-Elements at Fe Grain Boundaries: *Ab Initio* Local-Energy Analysis573
第26回日本 MRS 年次大会
神奈川県横浜市 万国橋会議センター (2016.12.19-22) No.D4-O20-003 (Oral)
S. Kr. Bhattacharya, M. Kohyama, S. Tanaka and Y. Shihara

<2017年>

1. ビーライト表面への水分子吸着の第一原理計算……………574
平成28年度土木学会東北支部技術研究発表会
東北工業大学 八木山キャンパス (2017.3.4) No.V-10 (Oral)
桜田良治、鶴沢正美、細川佳史、川添良幸、Abhishek Kumar Singh
2. DMAPS のテラヘルツスペクトルの温度依存性と理論解析……………576
平成29年度東北地区若手研究者研究発表会発表会
東北学院大学 多賀城キャンパス (2017.3.4) No.YS29-2-1-4 (Oral)
菊池星、高橋まさえ、三膳真也、須藤駿、松井広志、森本展行、鈴木誠
3. ニコチンアミドのテラヘルツスペクトルの温度依存性に関する第一原理計算…578
平成29年度東北地区若手研究者研究発表会発表会
東北学院大学 多賀城キャンパス (2017.3.4) No.YS29-2-1-5 (Oral)
樊欣熠、高橋まさえ、岡村暢之
4. 電子照射に誘起される空孔の非熱的移動過程……………580
日本金属学会 2017年春期(第160回)講演大会
首都大学東京 南大沢キャンパス (2017.3.15-17) No.170 (Oral)
五月女貴平、佐藤裕樹、阿部弘亨、松川義孝、叶野翔
5. 第一原理繰り込みポテンシャルを用いた NiAl 二元系合金の状態図計算……………581
日本金属学会 2017年春期(第160回)講演大会
首都大学東京 南大沢キャンパス (2017.3.15-17) No.288 (Oral)
佐原亮二、長田俊郎、Swastibrata Bhattacharyya、大野かおる
6. First-principles study of stability of γ -Cr_{23-x}Fe_xC₆ precipitates: The effect of metal site occupancy……………582
日本金属学会 2017年春期(第160回)講演大会
首都大学東京 南大沢キャンパス (2017.3.15-17) No.289 (Oral)
Maaouia Souissi, Ryoji Sahara, Marcel H. F. Sluiter, Tetsuya Matsunaga
and Masaaki Tabuchi

7. First Principles Molecular Dynamics study for oxidation on Ti surface at elevated temperature583
日本金属学会 2017 年春期(第 160 回)講演大会
首都大学東京 南大沢キャンパス (2017.3.15-17) No.J4 (Oral)
Somesh Kumar Bhattacharya, Ryoji Sahara, Tomonori Kitashima,
Kyosuke Ueda and Takayuki Narushima
8. 氷表面の静電場による H+CO の活性化エネルギー変化のメカニズム.....584
日本化学会第 97 春季年会(2017)
慶應義塾大学 日吉キャンパス (2017.3.16-19) No.2PA-183 (Oral)
桑畑和明、大野かおる
9. 《フォノンの粗視化》による強誘電体の高速分子動力学シミュレーション ...585
日本物理学会第 72 回年次大会
大阪大学 豊中キャンパス (2017.3.17-20) No.18pD32-3 (Symposium)
西松毅
10. 局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発：物理的な意味の検討と粒界への適用587
日本物理学会第 72 回年次大会
大阪大学 豊中キャンパス (2017.3.17-20) No.17pC44-7 (Oral)
香山正憲、田中真悟、椎原良典
11. ニコチンアミドのテラヘルツスペクトルの温度依存性：非調和性と水素結合ネットワーク588
日本物理学会第 72 回年次大会
大阪大学 豊中キャンパス (2017.3.17-20) No.18aC21-4 (Oral)
高橋まさえ、岡村暢之、樊欣熠
12. カーボンナノチューブにおける終端幾何 - エネルギーギャップ相関：第一原理的アプローチ589
日本物理学会第 72 回年次大会
大阪大学 豊中キャンパス (2017.3.17-20) No.17aC-PS-1 (Poster)
谷川幸晴、小野頌太、桑原理一、大野かおる

13. GW 近似による絶縁体と半導体に対する内殻電子準位の第一原理計算 ……………590
日本物理学会第 72 回年次大会
大阪大学 豊中キャンパス (2017.3.17-20) No.20aC-PS-11 (Poster)
青木翼、大野かおる

V. 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591
2. 東北大学金属材料研究所構内図592
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図593