

# 2017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

(2017年4月～2018年3月)

### 目次

『巻頭言』・・・・・・・・・・・・・・・・・・計算材料学センター長 久保百司

#### I. 研究内容概要

1. 核融合炉タングステンダイバータ板の熱挙動解析 .....1  
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
2. 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 .....3  
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる  
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
3. 固体中のイオン伝導の分子動力学シミュレーション .....6  
産業技術総合研究所 中西毅、池庄司民夫、Sau Kartik  
東北大学金属材料研究所 高木成幸

4. エーライト(C<sub>3</sub>S)への水分子吸着機構の数値解析…………… 10  
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 Vladimirovich 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  
Materials Research Centre, Indian Institute of Science, India  
Abhishek Kumar Singh
5. クラスタ複合物質の化学的性質解明へ向けた実験および理論的研究 …… 12  
豊田工業大学 市橋正彦、安松久登  
九州大学大学院理学研究科 寺寄亨  
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
6. 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 …… 14  
高エネルギー加速器研究機構 塚原宙、小野寛太
7. 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… 19  
物質・材料研究機構 佐原亮二、Bhattacharya Somesh Kumar、  
Souissi Maaouia  
韓国科学技術研究院 水関博志、Ram Babu  
Ulsan National Institute of Science and Technology Choi Keunsu
8. 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 …… 22  
秋田工業高等専門学校 上林一彦
9. 計算科学を用いたナノ粒子の表面緩和構造と物性に関する研究 …… 23  
名古屋大学大学院工学研究科 高見誠一  
東北大学材料科学高等研究所 横哲
10. Topological data analysis of non-equilibrium materials…………… 27  
Center for high Pressure Science and Technology Advanced  
Research, Beijing, China Qingyang Hu  
Kochi University of Technology, Japan Takeshi Fujita

11. 結晶性ビタミンのテラヘルツスペクトルに観測される分子間水素結合伸縮振動 ..... 28  
 東北大学農学研究科 高橋まさえ
12. A study on hydrogen accelerated oxidation mechanism of Nickel-based alloys ..... 32  
 New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University, Japan  
 Nishith K. Das, Tetsuo Shoji
13. マルチレベルトライボロジーシミュレータの開発 ..... 37  
 東北大学未来科学技術共同研究センター 三浦隆治、鈴木愛、畠山望、宮本明
14. 高磁歪新材料設計のための第一原理計算と単結晶中磁区移動シミュレーション ..... 41  
 東北大学金属材料研究所 張岩、梅津理恵  
 Gumilyov Eurasian National University Talgat Inerbaev  
 SRM University, AP-Amarabati 志田和人  
 東北大学多元物質材料研究所 鈴木茂
15. 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 ..... 44  
 東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
16. 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 ..... 48  
 東北大学未来科学技術共同研究センター 横田有為
17. 3次元積層造形法における粉末融解シミュレーション ..... 51  
 東北大学工学研究科 菊池圭子
18. イオン液体の粘性に関する統合的理論算定 ..... 53  
 東北大学環境科学研究科 中村崇
19. 3GeV 高輝度放射光 SLiF-J の光アブソーバの熱構造解析と電磁石形状の最適化 ..... 55  
 東北大学多元物質科学研究所 西森信行  
 東北大学電子光理学研究センター 三浦禎男

20. First-principles study of physical properties of Fe-based alloy and relevant materials · 60  
 School of Engineering, Tohoku University, Japan Ying Chen,  
 Arkapol Saengdeejing, Lei Wang, Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey  
 Shanghai University Institute of Fluid Physics, China Hua Y. Gneg  
 National Institute for Materials Science (NIMS), Japan Chuang Liu  
 Graduate School of Engineering, Shizuoka University, Japan Toshiharu Hoshino  
 Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia Ivan Štich,  
 Jan Brndiar  
 Indian Institute of Science Education and Research (IISER), India  
 Ghosh Prasenjit, Kabir Mukul
21. セリウム酸化物における酸素空孔の秩序化 ..... 65  
 東北大学金属材料研究所 小無健司、吉田健太、八登唯夫、富田祐美恵、  
 永井康介
22. 水素 8 配位錯イオンの stereochemistry ..... 70  
 東北大学金属材料研究所 高木成幸、池庄司民夫、横山凱乙、折茂慎一  
 東北大学材料科学高等研究所 折茂慎一
23. 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 ..... 73  
 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
24. 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 II ..... 77  
 東北大学金属材料研究所 寺田弥生、Sankar Deb Nath  
 ICMPE, France Jean-Claude Crivello
25. Phase-Field 法を用いた耐熱合金中の組織形成の研究 ..... 83  
 大阪大学工学研究科 小泉雄一郎  
 東北大学金属材料研究所 山崎敏広、朱伝奇、千葉晶彦  
 京都大学工学研究科 弓削是貴、岸田恭輔、乾晴行
26. THEORETICAL DESCRIPTION OF STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP OF  
 FUNCTIONAL NANOPOROUS MATERIALS BASED ON ACCURATE  
 ESTIMATION OF GUEST-HOST INTERACTION ..... 85  
 Institute for Material Research, Tohoku University, Sendai, Japan  
 R. V. Belosludov

27. 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 ..... 89  
 広島工業大学 佐藤裕樹  
 東北大学金属材料研究所 松川義孝、段振剛、西村憲治  
 東京大学大学院工学系研究科 阿部弘亨、叶野翔、楊会龍、申晶潔、  
 趙子寿
28. 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 ..... 90  
 東北大学金属材料研究所 大谷優介、許競翔、高橋直己、陳茜、王楊、  
 上原周一、樋口祐次、尾崎伸樹、久保百司
29. レーザー加熱インプリント加工を用いた、高アスペクト比回折格子の作製技術の  
 構築 ..... 96  
 東北大学工学研究科 達久将成  
 東北大学金属材料研究所 加藤秀美
30. Li/Mg 蓄電池の正負極活物質の酸化還元電位とイオン伝導機構 ..... 98  
 東北大学金属材料研究所 岡本範彦、李弘毅、市坪哲
31. イオン液体・イオン性液晶材料における構造と動力学 ..... 100  
 東北大学金属材料研究所 芝隼人、彭海龙
32. 高信頼性構造材料 ..... 103  
 産業技術総合研究所 香山正憲、徐卓、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、Swastibrata Bhattacharyya  
 物質・材料研究機構 佐原亮二
33. 金属イオン交換ゼオライト触媒を用いたメタン活性化の密度汎関数法に基づく  
 熱化学計算 ..... 110  
 東北大学金属材料研究所 山崎馨
34. Coarsening of connected structures by surface diffusion ..... 112  
 Institute for Material Research, Tohoku University, Sendai, Japan  
 Pierre-Antoine Geslin, Takeshi Wada, Hidemi Kato

## II. 原著論文

### <2016 年>

1. Many-electron states of the N2 and N3 color centers in diamond: A firstprinciples and many-body study ..... 117  
Physica B, 505 (2016) pp.17-21  
Mohsen Babamoradia, Sussan Asgari, Ahmad Ranjbar, Rodion V. Belosludov,  
Seiji Yunoki

<2017 年>

1. Quasiperiodic canonical-cell tiling with pseudo icosahedral symmetry ..... 122  
Ann. Phys., 385 (2017) pp.225-286  
Nobuhisa Fujita
2. Initial Water Adsorption Property of Manganese-Doped Belite by First-Principles  
Calculation ..... 184  
J. Civil Eng. Architect. Res., 4[5] (2017) pp.2011-2018  
Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Syun-ichiro Uchida,  
Yoshiyuki Kawazoe, Rodion Vladimirovich Belosludov, Aaditya Manjanath  
and Abhishek Kumar Singh
3. Flat building blocks for flat silicone ..... 192  
Sci. Rep., 7 (2017) Art.No.10855  
Masae Takahashi
4. A molecular heterojunction of zinc phthalocyanine and peanut-shaped fullerene polymer:  
A density functional study ..... 200  
Chem. Phys. Lett., 686 (2017) pp.68-73  
Kousei Tanikawa, Kaoru Ohno, Yusuke Noda, Shota Ono, Riichi Kuwahara,  
Akito Takashima, Masato Nakaya, Jun Onoe
5. Chemical Insights from Theoretical Electronic States in Nickel Hydroxide and  
Monolayer Surface Model ..... 206  
J. Phys. Chem. C, 121[44] (2017) pp.24603-24611  
Yuki Sakamoto, Yusuke Noda, Kaoru Ohno and Shinichiro Nakamura
6. Ni nanoparticle-decorated reduced graphene oxide for non-enzymatic glucose sensing:  
An experimental and modeling study ..... 215  
Electrochim. Acta, 240 (2017) pp.388-398  
S. Darvishi, M. Souissi, F. Karimzadeh, M. Kharaziha, R. Sahara, S. Ahadian
7. First principles study of oxidation of Si-segregated  $\alpha$ -Ti(0001) surfaces ..... 226  
Jpn. J. Appl. Phys., 56 (2017) Art.No.125701  
Somesh Kr. Bhattacharya, Ryoji Sahara, Tomonori Kitashima, Kyosuke Ueda  
and Takayuki Narushima

8. Effect of Si on the oxidation reaction of  $\alpha$ -Ti(0001) surface: *ab initio* molecular dynamics study .....233  
 Sci. Technol. Adv. Mater, 18[1] (2017) pp.998-1004  
 Somesh Kr. Bhattacharya , Ryoji Sahara, Kyosuke Ueda  
 and Takayuki Narushima
  
9. チタンの計算材料科学 .....240  
 軽金属, 67 (2017) pp.653-661  
 上杉徳照、佐原亮二
  
10. First-principles study of the phase stability and elastic properties of Ti-X alloys (X = Mo, Nb, Al, Sn, Zr, Fe, Co, and O) .....249  
 J. Alloys Compd., 727 (2017) pp.579-595  
 Wenchong Zhou, Ryoji Sahara, Koichi Tsuchiya
  
11. Effect of processing strain rate and temperature on interfacial segregation of zinc in a magnesium alloy .....266  
 Mater. Sci. Eng., A, 703 (2017) pp.54-67  
 Dudekula Althaf Basha, Ryoji Sahara, Hidetoshi Somekawa, Alok Singh,  
 Koichi Tsuchiya
  
12. First-principles calculations of hydrogen interactions with nickel containing a monovacancy and divacancies .....280  
 Mater. Res. Express, 4 (2017) Art.No.076505  
 Nishith K Das, Tetsuo Shoji, Takeharu Nishizumi, Taishi Fukuoka,  
 Takeshi Sugawara, Ryouta Sasaki, Tadashi Tatsuki, Hideki Yuya, Keisuku Ito,  
 Kimihisa Sakima, Kazuya Tsutsumi, Suguru Ooki, Yuichiro Sueishi  
 and Kiyoko Takeda
  
13. Effects of Cr-doping on the adsorption and dissociation of S, SO, and SO<sub>2</sub> on Ni(111) surfaces .....290  
 J. Chem. Phys., 146[15] (2017) Art.No.154701  
 Nishith K. Das and Wissam A. Saidi



14. Polarons in endohedral  $\text{Li}^+\text{@C}_{60}^-$  dimers and in 1D and 2D crystals .....298  
Solid State Commun., 265 (2017) pp.1-5  
Yoshiyuki Kawazoe, Vladimir R. Belosludov, Ravil K. Zhdanov,  
Rodion V. Belosludov
  
15. Monoclinic  $\text{C}_{16}$ :  $sp^2$ -  $sp^3$  hybridized nodal-line semimetal protected by PT-symmetry .. 303  
Carbon, 127 (2017) pp.527-532  
Xing Feng, Quansheng Wu, Yong Cheng, Bin Wen, Qian Wang,  
Yoshiyuki Kawazoe, Puru Jena
  
16. Quantum scar and breakdown of universality in graphene: A theoretical insight ..... 309  
Int. J. Mod. Phys. B, 31[32] (2017) Art.No.1750257  
Kombiah Iyakutti, Ratnavelu Rajeswarapalanichamy, Velappa Jayaraman Surya  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
17. Theoretical prediction of two-dimensional functionalized MXene nitrides as topological  
insulators ..... 319  
Phys. Rev. B, 96[19] (2017) Art.No.195414  
Yunye Liang, Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Masao Arai, Seiji Yunoki,  
Yoshiyuki Kawazoe, Hongming Weng and Zhong Fang
  
18. Gamma ( $\gamma$ )-ray irradiated multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) for hydrogen  
storage ..... 328  
Appl. Surf. Sci., 418 (2017) pp.49-55  
D. Silambarasan, V. J. Surya, K. Iyakutti, K. Asokan, V. Vasu, Y. Kawazoe
  
19. Weak interlayer dependence of lattice thermal conductivity on stacking thickness of  
penta-graphene ..... 335  
Appl. Phys. Lett., 111[19] (2017) Art.No.192102  
Fancy Qian Wang, Jie Liu, Xiaoyin Li, Qian Wang and Yoshiyuki Kawazoe
  
20. *Ab initio* direct dynamics of transition metal atom/dimers bombardments onto graphene:  
Evolution of magnetic alignment..... 340  
Carbon, 115 (2017) pp.791-802  
Hieu T. Nguyen-Truong, Hung M. Le, Yoshiyuki Kawazoe, Duc Nguyen-Manh

21. Body-Centered Tetragonal C<sub>16</sub>: A Novel Topological Node-Line Semimetallic Carbon Composed of Tetrarings ..... 352  
small, 13 (2017) Art.No.1602894  
 Yong Cheng, Xing Feng, Xiaoting Cao, Bin Wen, Qian Wang,  
 Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
  
22. Bipolar Magnetic Materials Based on 2D Ni[TCNE] Metal–Organic Coordination Networks ..... 359  
Adv. Electron. Mater., 4[2] (2017) Art.No.1700323  
 Yu Chen, Junyi Liu, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
  
23. Improvement of dopant distribution in radial direction of single crystals grown by micro-pulling-down method ..... 368  
J. Cryst. Growth, 474 (2017) pp.178-182  
 Yuui Yokota, Tetsuo Kudo, Valery Chani, Yuji Ohashi, Shunsuke Kurosawa,  
 Kei Kamadaa, Zhong Zeng, Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa
  
24. Skin Effect of Rotating Magnetic Fields in Liquid Bridge ..... 373  
J. Magn., 22[2] (2017) pp.333-343  
 Yi Zhang, Zhong Zeng, Liping Yao, Yuui Yokota, Yoshi Kawazoe  
 and Akira Yoshikawa
  
25. Effects of dopant distribution improvement on optical and scintillation properties for Ce-doped garnet-type single crystals ..... 384  
J. Mater. Sci. - Mater. Electron., 28[10] (2017) pp.7151-7156  
 Yuui Yokota, Tetsuo Kudo, Yuji Ohashi, Shunsuke Kurosawa, Kei Kamada,  
 Zhong Zeng, Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa
  
26. ZnO nested shell magic clusters as tetrapod nuclei ..... 390  
RSC Adv., 7[35] (2017) pp.21933-21942  
 Andriy Dmytruk, Igor Dmitruk, Yevhen Shynkarenko, Rodion Belosludov  
 and Atsuo Kasuya

27. Magnetic Circular Dichroism of Transition-Metal Complexes of Perfluorophenyl-N-Confused Porphyrins: Inverting Electronic Structure through a Proton .....400  
 J. Phys. Chem. A, 121 (2017) pp.3689-3698  
 Samantha Doble, Allen J. Osinski, Shelby M. Holland, Julia M. Fisher, G. Richard Geier, Rodion V. Belosludov, Christopher J. Ziegler and Victor N. Nemykin
28. Theoretical modeling of the thermodynamic properties and the phase diagram of binary gas hydrates of argon and hydrogen .....410  
 Fluid Phase Equilib., 434 (2017) pp.87-92  
 Ravil K. Zhdanov, Kirill V. Gets, Rodion V. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Yulia Y. Bozhko, Vladimir R. Belosludov
29. Modeling the polymorphic transformations in amorphous solid ice .....416  
 J. Alloys Compd., 707 (2017) pp.108-113  
 Rodion V. Belosludov, Kirill V. Gets, Oleg S. Subbotin, Ravil K. Zhdanov, Yulia Yu. Bozhko, Vladimir R. Belosludov, Jun-ichi Kudoh
30. Mechanical properties of Fe rich Fe–Si alloys: *ab initio* local bulk-modulus viewpoint ..422  
 Mater. Res. Express, 4 (2017) Art.No.116518  
 Somesh Kr Bhattacharya, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, Yoshinori Shiihara, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen and Tetsuo Mohri
31. Ammonia Dehydrogenation on Cobalt Cluster Cations Doped with Niobium .....437  
 Top. Catal., 61 (2017) pp.35-41  
 Shinichi Hirabayashi, Masahiko Ichihashi
32. Parallel Large-Scale Molecular Dynamics Simulation Opens New Perspective to Clarify the Effect of a Porous Structure on the Sintering Process of Ni/YSZ Multiparticles .....444  
 ACS. Appl. Mater. Interfaces, 9 (2017) pp.31816-31824  
 Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Kazuhisa Sato, Toshiyuki Hashida and Momoji Kubo
33. Exceptional Thermoelectric Properties of Layered GeAs<sub>2</sub> .....453  
 Chem. Mater., 29 (2017) pp.9300-9307  
 Fancy Qian Wang, Yaguang Guo, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

34. Subatomic-scale force vector mapping above a Ge(001) dimer using bimodal atomic force microscopy .....461  
 Nat. Phys., 13 (2017) pp.663-668  
 Yoshitaka Naitoh, Robert Turanský, Ján Brndiar, Yan Jun Li, Ivan Štich and Yasuhiro Sugawara
35. Limitations of Structural Superlubricity:Chemical Bonds versus Contact Size.....467  
 ACS Nano, 11 (2017) pp.7642-7647  
 Dirk Dietzel, Ján Brndiar, Ivan Štich and André Schirmeisen
36. Origin of the Substitution Mechanism for the Binding of Organic Ligands on the Surface of CsPbBr<sub>3</sub> Perovskite Nanocubes .....473  
 J. Phys. Chem. Lett., 8 (2017) pp.4988-4994  
 Vikash Kumar Ravi, Pralay K. Santra, Niharika Joshi, Jeetender Chugh, Sachin Kumar Singh, Håkan Rensmo, Prasenjit Ghosh and Angshuman Nag
37. Magnetic and electronic crossovers in graphene nanoflakes .....480  
 Phys. Rev. B, 95 (2017) Art.No.174419  
 Shreemoyee Ganguly, Mukul Kabir and Tanusri Saha-Dasgupta
38. Structural, Electronic, and Optical Properties of Cu<sub>2</sub>NiSnS<sub>4</sub>: A Combined Experimental and Theoretical Study toward Photovoltaic Applications .....489  
 Chem. Mater., 29 (2017) pp.3133-3142  
 Sachin Rondiya, Nitin Wadnerkar, Yogesh Jadhav, Sandesh Jadkar, Santosh Haram and Mukul Kabir
39. Two Regimes of Bandgap Red Shift and Partial Ambient Retention in Pressure-Treated Two-Dimensional Perovskites .....499  
 ACS Energy Lett., 2 (2017) pp.2518-2524  
 Gang Liu, Lingping Kong, Peijun Guo, Constantinos C. Stoumpos, Qingyang Hu, Zhenxian Liu, Zhonghou Cai, David J. Gosztola, Ho-kwang Mao, Mercuri G. Kanatzidis and Richard D. Schaller

40. Systematic First-Principles Study of Binary Metal Hydrides .....506  
ACS Comb. Sci., 19 (2017) pp.513-523  
Natacha Bourgeois, Jean-Claude Crivello, Pierre Cenedese  
and Jean-Marc Joubert
41. A Molecular Dynamics Study of Partitionless Solidification and Melting of Al–Cu  
Alloys .....517  
ISIJ Int., 57[10] (2017) pp.1774-1779  
Sankar Kumar DEB NATH, Yasushi SHIBUTA, Munekazu OHNO,  
Tomohiro TAKAKI and Tetsuo MOHRI

<2018 年>

1. Undersize solute element effects on defect structure development in copper under electron irradiation ..... 523  
Philos. Mag., 98[8] (2018) pp.646-672  
Y. Satoh, T. Yoshiie and S. Arai
2. Intermolecular hydrogen bond stretching vibrations observed in terahertz spectra of crystalline vitamins ..... 550  
Cryst. Eng. Comm., 20 (2018) pp.1960-1969  
Masae Takahashi, Nobuyuki Okamura, Xiaomeng Ding, Hitoshi Shirakawa and Hiroaki Minamide
3. Extensive first-principles molecular dynamics study on Li encapsulation into C<sub>60</sub> and its experimental confirmation ..... 560  
Nanoscale, 10 (2018) pp.1825-1836  
K. Ohno, A. Manjanath, Y. Kawazoe, R. Hatakeyama, F. Misaizu, E. Kwon, H. Fukumura, H. Ogasawara, Y. Yamada, C. Zhang, N. Sumi, T. Kamigaki, K. Kawachi, K. Yokoo, S. Ono and Y. Kasama
4. First-principles study on the atomistic corrosion processes of iron ..... 572  
Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018) pp.1653-1663  
Khian-Hooi Chew, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
5. Fast Lithium-Ion Conduction in Atom-Deficient *closo*-Type Complex Hydride Solid Electrolytes ..... 583  
Chem. Mater., 30 (2018) pp.386-391  
Sangryun Kim, Naoki Toyama, Hiroyuki Oguchi, Toyoto Sato, Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji and Shin-ichi Orimo
6. Weakly spin-dependent band structures of antiferromagnetic perovskite LaMO<sub>3</sub> (M = Cr, Mn, Fe) ..... 589  
J. Phys.: Condens. Matter, 30 (2018) Art.No.075502  
Takuya Okugawa, Kaoru Ohno, Yusuke Noda and Shinichiro Nakamura

7. Adsorption and diffusion of H and O on an Ni(111) surface containing different amounts of Cr ..... 602  
 Appl. Surf. Sci., 445 (2018) pp.217-228  
 Nishith Kumar Das, Tetsuo Shoji
  
8. Topological Nodal-Net Semimetal in a Graphene Network Structure ..... 614  
 Phys. Rev. Lett., 120[2] (2018) Art.No.026402  
 Jian-Tao Wang, Simin Nie, Hongming Weng, Yoshiyuki Kawazoe  
 and Changfeng Chen
  
9. Molecular dynamics study of mesophase transitions upon annealing of  
 imidazolium-based ionic liquids with long-alkyl chains ..... 619  
 PCCP, 20 (2018) pp.9796-9805  
 Hailong Peng, Momoji Kubo and Hayato Shiba
  
10. Enhancing Intermolecular Interaction by Cyano Substitution in Copper Phthalocyanine ... 629  
 J. Phys. Chem. C, 122 (2018) pp.429-437  
 Rejaul Sk, Srilatha Arra, Barun Dhara, Joel S. Miller, Mukul Kabir  
 and Aparna Deshpande
  
11. Optical properties of dense lithium in electride phases by first-principles calculations ... 638  
 Sci. Rep., 8 (2018) Art.No.3868  
 Zheng Yu, Hua Y. Geng, Y. Sun and Y. Chen
  
12. Ab-Initio Calculations for Solvus Temperatures of Pd-Rich PdRu Alloys: Real-Space  
 Cluster Expansion and Cluster Variation Method ..... 652  
 Mater. Trans., 59[3] (2018) pp.338-347  
 Chang Liu, Mitsuhiro Asato, Nobuhisa Fujima, Toshiharu Hoshino, Ying Chen  
 and Tetsuo Mohri
  
13. Photocatalytic Activity of Phosphorene Derivatives: Coverage, Electronic, Optical, and  
 Excitonic Properties ..... 662  
 J. Phys. Chem. C, 122 (2018) pp.7194-7202  
 Srilatha Arra, K. R. Ramya, Rohit Babar and Mukul Kabir

14. Engineering the Kondo state in two-dimensional semiconducting phosphorene .....671  
Phys. Rev. B, 97 (2018) Art.No.045132  
Rohit Babar and Mukul Kabir



### III. 国際会議発表論文

#### < Proceeding >

1. Water Adsorption on Dicalcium Silicate Surface Doped with a Trace Element .....679  
Proceedings of 42nd Conference on Our World in Concrete & Structures, Vol.36  
(2017), pp.377-382  
42nd Conference on Our World in Concrete & Structures  
R. Sakurada, M. Uzawa, Y. Hosokawa, Y. Kawazoe and A. K. Singh

<2017 年>

1. Ab-Initio Local-Energy Analysis of Fe/TiC Interfaces ..... 685  
2017 5th International Workshop on Low-Temperature Bonding for 3D  
Integration(LTB-3D 2017)  
Tokyo, Japan(2017.5.16-18) No.16GO-02 (Oral)  
Masanori Kohyama, Vikas Sharma, Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara
  
2. Cluster-Cluster Collisions and Cluster-Complex Formation of Helium Clusters with  
Size-Selected Metal Cluster Ion ..... 686  
Conference on Quantum Fluid Clusters (QFC 2017)  
Obergurgl, Austria(2017.6.6-9) (Invited)  
Masahiko Ichihashi and Hideho Odaka
  
3. Stability of NdFe<sub>12</sub>(N) Series Compounds: A First-principles Study ..... 687  
CALPHAD XLVI  
Saint-Malo, France(2017.6.12-0) No.O2 (Oral)  
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
  
4. Atomistic-level description of clathrate hydrates structure-property relationships toward  
gas storage and separation:Lattice dynamics and first-principles methods ..... 688  
The 9th International Conference on Gas Hydrates  
Denver, USA(2017.6.25-30) No.1718 (Oral)  
Rodion V. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Ravil K. Zhdanov, Yulia Yu. Bozhko,  
Kirill V. Gets, Yoshiyuki Kawazoe, Vladimir R. Belosludov
  
5. First-principles Modeling of Several Functional Oxides ..... 696  
10th International Symposium on Transparent Oxide  
and Related Materials for Electronics and Optics  
Tokyo, Japan(2017.7.3-5) No.3aI02 (Invited)  
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Tetsuo Mohri and Shuichi Iwata

6. Origin of Stability and Mixing Feature of Binary Systems Relevant to Multi-component Phase in Nd-Fe-B .....697  
 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS 9)  
 Kuala Lumpur, Malaysia(2017.8.8-11) No.T3-I-10 (Invited)  
 Ying Chen and Arkapol Saengdeejing
  
7. Theoretical investigation of the phase stability and elastic property in Ti-X alloys ....698  
 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS 9)  
 Kuala Lumpur, Malaysia(2017.8.8-11) No.T3-I-26 (Invited)  
 Ryoji Sahara, Wenchong Zhou and Koichi Tsuchiya
  
8. Adsorption of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> onto Copper-based Clusters.....699  
 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS 9)  
 Kuala Lumpur, Malaysia(2017.8.8-11) No.T6-I-12 (Invited)  
 Masahiko Ichihashi and Shinichi Hirabayashi
  
9. Design of Porphyrin-based Functional Nanoporous Material .....700  
 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS 9)  
 Kuala Lumpur, Malaysia(2017.8.8-11) No.T6-I-20 (Invited)  
 Rodion Belosludov
  
10. First Principles Molecular Dynamics study for oxidation on Ti surface at elevated temperature.....701  
 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS 9)  
 Kuala Lumpur, Malaysia(2017.8.8-11) No.T8-I-12 (Invited)  
 Somesh Kr. Bhattacharya, Ryoji Sahara, Kyosuke Ueda  
 and Takayuki Narushima



16. Conceptual design of the functional defects and dopants in carbon-based nanomaterials ... 707  
MRS Fall Meeting  
Boston, USA(2017.11.26-1) No.TC07.01.04 (Oral)  
Rodion Belosludov, Victor Nemykin
17. Theoretical aspects in realization of functional nanomaterials for energy and medical applications ..... 708  
The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
Science-Virtual Organization  
Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Keynote-2 (Keynote)  
Rodion Belosludov
18. First-principles Calculation of Coefficient of Oxygen Self-diffusion in t-ZrO<sub>2</sub> ..... 709  
The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
Science-Virtual Organization  
Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Inv-2 (Invited)  
Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri
19. Flat Building Blocks for Flat Silicene ..... 710  
The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
Science-Virtual Organization  
Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Invited-7 (Invited)  
Masae Takahashi
20. Activation of Methane on Metal Clusters ..... 711  
The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
Science-Virtual Organization  
Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Invited-12 (Invited)  
Masahiko Ichihashi and Shinichi Hirabayashi

21. Oxygen migration and local structure change in ZrO<sub>2</sub> crystal with vacancies using molecular dynamics simulation ..... 712  
 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
 Science-Virtual Organization  
 Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Oral-1 (Oral)  
 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
22. Atomistic Modeling and Simulation of M<sub>2</sub>B<sub>12</sub>H<sub>12</sub> (M = Li or Na) ..... 713  
 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
 Science-Virtual Organization  
 Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Oral-17 (Oral)  
 Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo
23. First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Fe Grain Boundaries and Alloys ..... 714  
 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
 Science-Virtual Organization  
 Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.Oral-21 (Oral)  
 Masanori Kohyama, Zhuo Xu, Somesh Kr. Bhattacharya, Shingo Tanaka  
 and Yoshinori Shiihara
24. Simulation of powder bed preparation in additive manufacturing ..... 715  
 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
 Science-Virtual Organization  
 Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.PS-16 (Poster)  
 Keiko Kikuchi, Naoyuki Nomura, Akira Kawasaki
25. First-Principles Study of Belite Activation by Doping of a Trace Element ..... 716  
 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational materials  
 Science-Virtual Organization  
 Sendai, Japan(2017.12.17-19) No.PS-30 (Poster)  
 Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Syun-ichiro Uchida,  
 Yoshiyuki Kawazoe, Aaditya Manjanath and Abhishek Kumar Singh

<2018 年>

1. Solidus and liquidus phases in Cu-rich area of Al-Cu alloys by Monte Carlo/Molecular dynamics (MC/MD) simulations ..... 717  
The 8th AICS International Symposium  
Kobe, Japan(2018.2.7-8) No.P-16 (Poster)  
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki,  
Tetsuo Mohri
  
2. Theoretical design of flat building blocks for flat silicene with density functional theory calculations ..... 718  
15th Annual Congress on Materials Research and Technology  
Paris, France(2018.2.19-20) (Invited)  
Masae Takahashi
  
3. Theoretical Aspects in Realization of Effective Gas Storage and Separation Media based of Gas Hydrates ..... 719  
Natural Gas Hydrate Systems Gordon Research Conference  
Galveston, TX, USA(2018.2.25-2)  
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, Yu. Yu. Bozhko, K. V. Gets,  
Y. Kawazoe and V. R. Belosludov
  
4. Flat Building Blocks for Flat Silicene ..... 720  
APS March Meeting 2018  
Los Angeles, USA(2018.3.5-9) (Oral)  
M. Takahashi
  
5. Stability and Effects of Substitutional Elements in NdFe<sub>12</sub>-based Compounds ..... 721  
2018 TMS Annual Meeting & Exhibition  
Phoenix, USA(2018.3.12-15) (Invited)  
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing
  
6. First-principles calculation of self-diffusion of oxygen in zirconia ..... 722  
2018 TMS Annual Meeting & Exhibition  
Phoenix, USA(2018.3.12-15) (Invited)  
Ying Chen, Hubin Luo, Tetsuo Mohri

## IV. 予稿集

### <2017年>

1. 銅酸化物クラスター正イオンとアンモニアとの気相反応：水と窒素の生成 ……723  
ナノ学会 第15回大会  
北海道 北海道立道民活動センター (2017.5.10-12) No.P-82 (Poster)  
平林慎一、市橋正彦
2. Interfacial free energy of Al and Al rich Al-Cu alloys using atomistic simulations ……724  
第133回東北大学金属材料研究所講演会  
東北大学金属材料研究所 (2017.5.26) (Poster)  
S. K. Deb Nath, Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, T. Mohri
3. 第一原理計算による電極反応速度論 ……725  
日本分析化学会 第77回分析化学討論会  
龍谷大学深草学舎 (2017.5.27-28) No.B2002 (Invited)  
池庄司 民夫
4. 第一原理計算によるビーライトの水和活性評価の検討 ……726  
無機マテリアル学会第134回学術講演会  
日本大学理工学部船橋校舎 (2017.6.8-9) No.21 (Oral)  
細川佳史、桜田良治、川添良幸、鶴澤正美、A. Manjanath、  
A. K. Singh
5. Large-scale phase-field simulations ……728  
第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会  
東京大学小柴ホール (2017.7.11-12) No.E4 (Oral)  
M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, S. K. D. Nath and T. Mohri
6. Interfacial free energy of Al and Al rich Al-Cu alloys using atomistic simulations ……729  
第2回 CDMSI (ポスト「京」重点課題(7)) 研究会  
東京大学小柴ホール (2017.7.11-12) (Poster)  
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki,  
Tetsuo Mohri



7. Grain-boundary segregation of transition-metal solutes in bcc Fe: Ab-initio local-energy and local-stress analysis .....730  
日本金属学会 2017 年秋期(第 161 回)講演大会  
北海道大学 (2017.9.6-8) No.120 (Oral)  
Zhuo Xu, Shingo Tanaka, Masanori Kohyama
8. 粒界の第一原理引っ張り試験のバルク領域サイズ依存性の検討と局所エネルギー・局所応力法の適用 .....731  
日本金属学会 2017 年秋期 (第 161 回) 講演大会  
北海道大学 (2017.9.6-8) No.127 (Oral)  
香山正憲、王昊、田中真悟、陳迎
9.  $ZrO_2$  における酸素原子の自己拡散係数の第一原理計算 .....732  
日本金属学会 2017 年秋期 (第 161 回) 講演大会  
北海道大学 (2017.9.6-8) No.136 (Oral)  
陳迎、羅湖濱、毛利哲夫
10. 粉末床熔融結合法における粉末床形成シミュレーション .....733  
日本金属学会 2017 年秋期 (第 161 回) 講演大会  
北海道大学 (2017.9.6-8) No.397 (Oral)  
菊池圭子、野村直之、川崎亮
11.  $MoSi_2/Mo_5Si_3$  共晶合金の組織形成と界面偏析のフェーズフィールドシミュレーション .....734  
日本金属学会 2017 年秋期 (第 161 回) 講演大会 公募シンポジウム「金属間化合物の新たな可能性」  
北海道大学 (2017.9.6-8) No.S1.28  
小泉雄一郎、山崎敏広、朱伝奇、千葉晶彦、弓削是貴、岸田恭輔、乾晴行
12. 金属イオン交換 MFI ゼオライトによるメタン活性化に関する理論的研究 .....735  
第 120 回触媒討論会  
愛媛大学城北キャンパス (2017.9.12-14) No.2F01 (Oral)  
山崎馨、尾澤伸樹、久保百司

13. 銅を含む2成分クラスターへのCO<sub>2</sub>とH<sub>2</sub>の吸着 .....736  
第120回触媒討論会  
愛媛大学城北キャンパス (2017.9.12-14) No.3D09 (Oral)  
市橋正彦、平林慎一
14. 温度依存テラヘルツスペクトルで検出される分子間水素結合ネットワークと非調和性 .....737  
シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2017」  
東北大学理学研究科 (2017.9.14) No.6 (Invited)  
高橋まさえ
15. 水溶性ビタミンのテラヘルツ振動の特性 .....739  
シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2017」  
東北大学理学研究科 (2017.9.14) No.P17 (Poster)  
丁小萌、樊欣熠、岡村暢之、高橋まさえ
16. タルタルおよびタングステン窒化物クラスター正イオンによるメタンの活性化···740  
第11回分子科学討論会  
東北大学川内北キャンパス (2017.9.15-18) No.1B20 (Oral)  
平林慎一、市橋正彦
17. ヘリウムクラスター・コバルトクラスター複合体の形成と赤外光解離分光···742  
第11回分子科学討論会  
東北大学川内北キャンパス (2017.9.15-18) No.2P053 (Poster)  
尾高英穂、市橋正彦
18. 水溶性ビタミンの温度依存テラヘルツスペクトルの第一原理計算 .....744  
第11回分子科学討論会  
東北大学川内北キャンパス (2017.9.15-18) No.3P114 (Poster)  
丁小萌、樊欣熠、岡村暢之、高橋まさえ
19. 第一原理局所エネルギー・局所応力法による材料界面の研究 .....746  
2017年精密工学会秋季大会学術講演会  
大阪大学豊中キャンパス (2017.9.20-22) (Keynote)  
香山正憲

20. DMAPS の THz 振動吸収スペクトルの温度依存性と誘電率の影響 ..... 748  
 日本物理学会 2017 年秋季大会  
 岩手大学上田キャンパス (2017.9.21-24) No.24pA45-12 (Oral)  
 高橋まさえ、菊池星、肖雅馨、三膳真也、須藤駿、松井広志、森本展行、  
 鈴木誠
21. 第一原理局所応力に基づく局所弾性定数計算 : Fe-Si 合金への適用 ..... 749  
 日本物理学会 2017 年秋季大会  
 岩手大学上田キャンパス (2017.9.21-24) No.24pA45-12 (Oral)  
 香山正憲、Somesh Bhattacharya、田中真悟、椎原良典
22. 格子定数比の原子球近似依存について ..... 750  
 日本物理学会 2017 年秋季大会  
 岩手大学上田キャンパス (2017.9.21-24) No.21aPS-7 (Poster)  
 上林一彦
23. アルキルイミダゾリウムイオン液体における内部階層構造と遅い緩和についての  
 の分子動力学計算 ..... 751  
 第 31 回分子シミュレーション討論会  
 石川県金沢市 金沢商工会議所 (2017.11.29-12.1) No.152P (Poster)  
 彭海龙、芝隼人
24. 金属イオン交換 MFI ゼオライト触媒を用いたメタン活性化に関する  
 理論的研究 ..... 753  
 第 33 回ゼオライト研究発表会  
 岐阜県岐阜市 長良川国際会議場 (2017.11.30-12.1) No.B25 (Oral)  
 山崎馨、尾澤伸樹、久保百司
25. Large scale simulations of solidification and grain growth at atomistic and  
 microstructural scales ..... 754  
 第 3 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 (2017.12.5-6) No.E2 (Oral)  
 M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, S. K. D. Nath, T. Mohri

26. Solidus-liquidus lines in Al-rich area of Al-Cu alloy using Monte Carlo/molecular dynamics (MC/MD) simulations .....755  
第3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 (2017.12.5-6) (Poster)  
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki,  
Tetsuo Mohri

<2018 年>

1. Study of the solidus-liquidus lines in Al-rich and Cu-rich areas of Al-Cu alloys by Monte Carlo/Molecular dynamics (MC/MD) simulations .....756  
Kick-off symposium for World Leading Research Centers –Materials Science and Spintronics-  
宮城県仙台市 仙台国際センター (2018.2.19-20) (Poster)  
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki,  
Tetsuo Mohri
2. 金属原子で置換したビーライトの水分子吸着特性 .....757  
平成 29 年度土木学会東北支部技術研究発表会  
日本大学郡山キャンパス (2018.3.3) No.V-14 (Oral)  
桜田良治、鶴澤正美、細川佳史、川添良幸、Abhishek Kumar Singh
3. Solidus and liquidus lines of Cu-Al alloys by Monte Carlo/Molecular dynamics (MC/MD) simulations .....759  
日本金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.94 (Oral)  
Sankar Kumar Deb Nath, Yasushi Shibuta, Munekazu Ohno, Tomohiro Takaki,  
Tetsuo Mohri
4. ZrO<sub>2</sub> 結晶 cubic 相における Schottky 欠陥の形成と酸素原子の拡散に対する局所構造の影響の解明 .....760  
日本金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.106 (Oral)  
寺田弥生、毛利哲夫
5. Segregation properties of 3d transition metal solutes in bcc Fe grain boundaries: Ab initio local energy and local stress analysis .....761  
日本金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.114 (Oral)  
Zhuo Xu, Shingo Tanaka, Masanori Kohyama

6. 局所応力の第一原理計算を用いた局所弾性定数の導出：Fe-Si 合金の濃度依存体積弾性率変化の機構説明 .....762  
日本金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.116 (Oral)  
Somesh Kr. Bhattacharya、香山正憲、田中真悟、椎原良典
7. 第三元素を添加した Fe-Ga 基合金の磁歪特性 .....763  
日本鉄鋼協会第 175 回春季講演大会  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.PS-65 (Poster)  
高橋巧、川又透、藤枝俊、篠田弘造、T. Inerbaev, 川添良幸、福田承生、鈴木茂
8. 粉末の流動性を考慮した離散要素法による粉末床形成シミュレーション .....764  
日本金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会 公募シンポジウム「医療・福祉のための Additive Manufacturing の材料科学 II」  
千葉大学新習志野キャンパス (2018.3.19-21) No.S2.3  
菊池圭子、Weiwei Zho、野村直之、川崎亮
9. フラットなシリセン実現に向けたフラットな構成単位の理論設計 .....765  
日本物理学会 第 73 回年次大会  
東京理科大学野田キャンパス (2018.3.22-25) No.22aB403-10 (Oral)  
高橋まさえ
10. He クラスタ内での極低温 Co クラスタイオンの近赤外光解離分光 .....766  
日本物理学会 第 73 回年次大会  
東京理科大学野田キャンパス (2018.3.22-25) No.24pK204-6 (Oral)  
尾高英穂、市橋正彦
11. 鉄粒界への 3d 遷移金属元素の偏析の第一原理計算：局所エネルギー・局所応力法の適用 .....767  
日本物理学会 第 73 回年次大会  
東京理科大学野田キャンパス (2018.3.22-25) No.25pK507-7 (Oral)  
徐卓、香山正憲、田中真悟、椎原良典

## 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 .....769
2. 東北大学金属材料研究所構内図 .....770
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図 .....771