

# 2018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

(2018年4月～2019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. 大規模第一原理計算による耐熱材料の相安定性と電子状態解析 ..... 1  
物質・材料研究機構 佐原亮二、S. K. Bhattacharya、M. Souissi  
韓国科学技術研究院 水関博志、Ram Babu  
Indian Institute of Science Education and Research  
Ghosh Prasenjit, Kanika Kohli
2. エーライト(C<sub>3</sub>S)への水分子吸着機構の数値解析 ..... 5  
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
3. 点欠陥の照射誘起移動過程の分子動力学計算 ..... 7  
広島工業大学 佐藤裕樹

4. 第一原理計算と実験データ解析によるナノ粒子の構造物性の解明 .....8  
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
5. 固体中のイオン伝導の分子動力学シミュレーション ..... 12  
産業技術総合研究所 数理先端材料モデリングオープンイノベーションラボ  
ラトリ 中西毅、池庄司民夫、Sau Kartik  
東北大学金属材料研究所 水素機能材料工学研究部門 高木成幸
6. 大規模シミュレーションと機械学習による高性能磁性材料の設計 ..... 19  
高エネルギー加速器研究機構 塚原宙、小野寛太
7. 分子と結晶の両方の全電子スペクトル計算プログラムの開発 ..... 24  
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる  
マレーシア・マラヤ大学 Khian-Hooi Chew  
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
8. 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 ..... 28  
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
9. 金属表面上の磁性分子のスピン状態に関する第一原理計算 ..... 30  
東京大学工学系研究科 南谷英美
10. 核融合炉タングステンダイバータ板の熱挙動解析 ..... 33  
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
11. イオン伝導機構を用いた新規メモリデバイス開発に向けた第一原理計算 ..... 35  
東京大学工学系研究科 清水康司、Wei Liu、岩橋大地、守屋孝紀、渡邊聡
12. 固溶型合金ナノ粒子触媒の分子吸着特性 ..... 37  
物質・材料研究機構 古山通久、難波優輔

13. 有機  $\pi$  共役ドナー・アクセプター材料物性の理論研究…………… 38  
日本女子大学 村岡梓、榎川佐保、太田希、近藤友美、林美晴、寺内礼華
14. ホウ素錯体を電子アクセプタとする高性能 n 型半導体の開発…………… 42  
名古屋工業大学大学院工学研究科 小野克彦
15. グラフェンのようにフラットなシリセンの理論設計を目指して…………… 46  
東北大学大学院農学研究科 高橋まさえ
16. イオン液体の粘性に関する統合的理論算定…………… 49  
東北大学大学院環境科学研究科 中村崇
17. 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・52  
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
18. Effect of strain on the early stage oxidation of Ni-Cr binary alloys…………… 55  
New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University, Japan  
Nishith K. Das, Tetsuo Shoji
19. 高信頼性第一原理シミュレーション計算によるマテリアルインフォマティクス  
を用いた新単結晶材料探索…………… 59  
東北大学金属材料研究所 横田有為
20. 燃料電池電解質材料におけるフォノン解析と水和構造の最適化…………… 62  
東北大学大学院理学研究科 松井広志、島谷和紀、佐々木智崇、船橋朱音、  
高野紗季
21. 3GeV 高輝度放射光 SLiT-J の光アブソーバの熱構造解析と電磁石形状の最適化… 66  
量子科学技術研究開発機構 西森信行  
東北大学電子光理学研究センター 三浦禎男
22. 3次元積層造形法における粉末熔融シミュレーション…………… 72  
東北大学・工学研究科 菊池圭子

23. High accuracy first-principles calculation of thermodynamic and diffusion properties ..... 75  
 School of Engineering, Tohoku University, Japan Ying Chen,  
 Arkapol Saengdeejing, Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey, Qinqiang Zhang,  
 Mariko Kadowaki  
 School of Materials Science and Engineering Shanghai University, China  
 Hao Wang  
 Beijing University of Science and Technology, China Lei Wang  
 Institute of Fluid Physics, China Hua Y. Gneg  
 Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia  
 Ivan Štich, Jan Brndiar  
 NIMTE, Chinese Academy of Sciences, China Hubin Luo  
 Indian Institute of Science Education and Research (IISER), Pune 411008, India  
 Kabir Mukul
24. 新規 2 次元炭素系材料設計 ..... 80  
 東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
25. Zr 水素化物中の水素移動の評価 ..... 85  
 東北大学金属材料研究所 小無健司、八登唯夫、富田祐美恵
26. レーザー加熱インプリント加工を用いた金属ガラス回折格子作製における、温度  
 分布のシミュレーション解析 ..... 87  
 東北大学金属材料研究所 達久将成、加藤秀実
27. 大規模分子動力学シミュレーションによるマルチスケール現象の解明と新規材  
 料設計への応用 ..... 89  
 東北大学金属材料研究所 久保百司、尾澤伸樹、大谷優介、許競翔、王楊、  
 陳茜、上原周一、宮崎成正、青山義昌、木村颯太
28. 高水素配位錯イオンにおける擬回転と相転移 ..... 94  
 東北大学金属材料研究所 高木成幸、池庄司民夫、横山凱乙
29. 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 ..... 96  
 東北大学金属材料研究所 岡本範彦、李弘毅、畠山拓也、市坪哲

30. THEORETICAL DESCRIPTION OF STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP OF FUNCTIONAL NANOPOROUS MATERIALS BASED ON ACCURATE ESTIMATION OF GUEST-HOST INTERACTION..... 99  
 Institute for Materials Research, Tohoku University R. V. Belosludov
31. 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 III ..... 104  
 東北大学金属材料研究所 計算物質科学人材育成コンソーシアム  
 寺田弥生  
 ICMPE, France Jean-Claude Crivello  
 東北大学金属材料研究所 Sankar DebNath、山田亮  
 Korea Institute of Materials Science , Korea Eun-Ae Choi  
 Universidade Federal Fluminense, Brazil Paulo Rios
32. 重い電子状態に対する第一原理計算手法の開発 ..... 109  
 東北大学金属材料研究所 鈴木通人  
 埼玉大学理工学研究科 星野晋太郎  
 立命館大学理工学部 池田浩章
33. 金属積層造形プロセスにおける溶融凝固挙動の解析 ..... 111  
 東北大学金属材料研究所 青柳健大  
 三菱重工株式会社 亘紀子
34. 複合液体材料の階層動力学の分子シミュレーション ..... 116  
 東北大学金属材料研究所 芝隼人
35. 高信頼性構造材料  
 産業技術総合研究所 香山正憲、徐卓、田中真悟、石橋章司 ..... 120  
 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
36. Carbon Behavior in BCC Iron from Atomistic Simulations ..... 127  
 Institute for NanoScience Design, Osaka University, Japan Tien Quang Nguyen
37. マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォームの開発 ..... 131  
 東北大学大学院理学研究科 村島隆浩、森井洋平、川勝年洋

## II. 原著論文

### <2017 年>

1. Gelatin methacryloyl hydrogel for glucose biosensing using Ni nanoparticles-reduced graphene oxide: An experimental and modeling study ..... 133  
Electrochimica Acta, 261 (2018) pp.275-283  
Sorour Darvishi, Maaouia Souissi, Mahshid Kharaziha, Fathallah Karimzadeh,  
Ryoji Sahara, Samad Ahadian

<2018 年>

1. Clathrate hydrates for energy storage and transportation ..... 142  
J. Phys.: Conf. Ser., 1128 (2018) Art. No. 012031  
V R Belosludov, Yu Yu Bozhko, K V Gets, O S Subbotin, Y Kawazoe
2. Influence of N<sub>2</sub> on Formation Conditions and Guest Distribution of Mixed CO<sub>2</sub> + CH<sub>4</sub>  
Gas Hydrates ..... 148  
Molecules, 23[12] (2018) pp.3336-3350  
Vladimir R. Belosludov, Yulia Yu. Bozhko, Oleg S. Subbotin,  
Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Kirill V. Gets, Yoshiyuki Kawazoe
3. Ozone storage capacity in clathrate hydrates formed by O<sub>3</sub> + O<sub>2</sub> + N<sub>2</sub> + CO<sub>2</sub> gas  
mixtures ..... 163  
Phys. Chem. Chem. Phys., 20[18] (2018) pp.12637-12641  
Oleg S. Subbotin, Yulia Yu. Bozhko, Ravil K. Zhdanov, Kirill V. Gets,  
Vladimir R. Belosludov, Rodion V. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe
4. Accurate quasiparticle calculation of x-ray photoelectron spectra of solids ..... 168  
J. Phys.: Condens. Matter, 30[21] (2018) Art. No. 21LT01  
Tsubasa Aoki, Kaoru Ohno
5. *GW*( $\Gamma$ ) method without the Bethe-Salpeter equation for photoabsorption energies of  
spin-polarized systems ..... 175  
Phys. Rev. A, 97[6] (2018) Art. No. 060502  
Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno
6. Mechanisms of oxidation of pure and Si-segregated  $\alpha$ -Ti surfaces ..... 181  
Appl. Surf. Sci., 463 (2019) pp.686-692  
Somesh Kr. Bhattacharya, Ryoji Sahara, Satoshi Suzuki, Kyosuke Ueda,  
Takayuki Narushima
7. Effect of mixed partial occupation of metal sites on the phase stability of  
 $\gamma$ -Cr<sub>23-x</sub>Fe<sub>x</sub>C<sub>6</sub> (x = 0-3) carbides ..... 188  
Sci. Rep., 8 (2018) Art. No. 7279  
Maaouia Souissi, Marcel H. F. Sluiter, Tetsuya Matsunaga, Masaaki Tabuchi,  
Michael J. Mills, Ryoji Sahara

8. Gas-Phase Reactions of Copper Oxide Cluster Cations with Ammonia: Selective Catalytic Oxidation to Nitrogen and Water Molecules ..... 197  
J. Phys. Chem. A, 122 (2018) pp.4801-4807  
Shinichi Hirabayashi, Masahiko Ichihashi
9. Heat loading behavior and thermomechanical analyses on plasma spray tungsten coated reduced-activation ferritic/martensitic steel ..... 204  
Fus. Eng. Des., 136 (2018) pp.1624-1628  
K. Tokunaga, T. Hotta, K. Araki, A. Kurumada, M. Tokitani, S. Masuzaki,  
K. Ezato, S. Suzuki, M. Enoeda, M. Akiba, M. Hasegawa, K. Nakamura
10. Strong chromate-adsorbent based on pyrrolic nitrogen structure: An experimental and theoretical study on the adsorption mechanism ..... 209  
Wat. Res., 145 (2018) pp.287-296  
Young-Jin Ko, Keunsu Choi, Soonjae Lee, Kyung-Won Jung, Seokwon Hong,  
Hiroshi Mizuseki, Jae-Woo Choi, Wook-Seong Lee
11. Tetrahexcarbon: A two-dimensional allotrope of carbon ..... 219  
Carbon, 137 (2018) pp.266-273  
Babu Ram, Hiroshi Mizuseki
12. Impact of Surface Energy on the Formation of Composite Metal Oxide Nanoparticles ... 227  
J. Phys. Chem. C, 122 (2018) pp.24350-24358  
Akira Yoko, Naoto Umezawa, Takahisa Ohno, Yoshito Oshima
13. 1,7-Dipyrene-Containing Aza-BODIPYs: Are Pyrene Groups Effective as Ligands To Promote and Direct Complex Formation with Common Nanocarbon Materials? ..... 236  
J. Phys. Chem. C, 122 (2018) pp.27893-27916  
Yuriy V. Zatsikha, Tanner S. Blesener, Philip C. Goff, Andrew T. Healy,  
Rachel K. Swedin, David E. Herbert, Gregory T. Rohde, Kullapa Chanawanno,  
Christopher J. Ziegler, Rodion V. Belosludov, David A. Blank,  
Victor N. Nemykin



14. Contrasting Roles of Water at Sliding Interfaces between Silicon-Based Materials: First-Principles Molecular Dynamics Sliding Simulations .....260  
 J. Phys. Chem. C, 122[19] (2018) pp.10459-10467  
 Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Takahiro Hatano, Momoji Kubo
  
15. Ionic Conductivity in Ionic Liquid Nano Thin Films.....269  
 ACS Nano, 12[10] (2018) pp.10509-10517  
 Shingo Maruyama, Ida Bagus Hendra Prastiawan, Kaho Toyabe, Yuji Higuchi, Tomoyuki Koganezawa, Momoji Kubo, Yuji Matsumoto
  
16. Molecular Interactions between Pentacene and Imidazolium Ionic Liquids: A Molecular Dynamics Study .....278  
 Chem. Lett., 47[9] (2018) pp.1154-1157  
 Ida Bagus Hendra Prastiawan, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Shingo Maruyama, Yuji Matsumoto, Momoji Kubo
  
17. A new 3D Dirac nodal-line semi-metallic graphene monolith for lithium ion battery anode materials .....282  
 J. Mater. Chem. A, 6[28] (2018) pp.13816-13824  
 Jie Liu, Xiaoyin Li, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe, Puru Jena
  
18. A metallic peanut-shaped carbon nanotube and its potential for CO<sub>2</sub> capture.....291  
 Carbon, 132 (2018) pp.249-256  
 Tianshan Zhao, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe, Puru Jena
  
19. Adsorption and diffusion of F<sub>2</sub> molecules on pristine graphene .....299  
 Chin. Phys. B, 27[10] (2018) Art. No. 106801  
 Yong Yang, Fu-Chi Liu, Yoshiyuki Kawazoe
  
20. Topological nodal line semimetal in an orthorhombic graphene network structure .....305  
 Phys. Rev. B, 97[24] (2018) Art. No. 245147  
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Yoshiyuki Kawazoe

21. Tuning the electronic and magnetic properties of graphene/*h*-BN hetero nanoribbon: A first-principles investigation ..... 312  
AIP Adv., 8[6] (2018) Art. No. 065111  
Tisita Das, Soubhik Chakrabarty, Y. Kawazoe, G. P. Das
  
22. Two-dimensional pentagonal CrX (X = S, Se or Te) monolayers: antiferromagnetic semiconductors for spintronics and photocatalysts ..... 321  
Phys. Chem. Chem. Phys., 20[27] (2018) pp.18348-18354  
Wenzhou Chen, Yoshiyuki Kawazoe, Xingqiang Shi, Hui Pan
  
23. Exploring new two-dimensional monolayers: pentagonal transition metal borides/carbides (penta-TMB/Cs) ..... 328  
J. Mater. Chem. A, 6[22] (2018) pp.10226-10232  
Yangfan Shao, Mengmeng Shao, Yoshiyuki Kawazoe, Xingqiang Shi, Hui Pan
  
24. New carbon allotropes in  $sp + sp^3$  bonding networks consisting of C<sub>8</sub> cubes ..... 335  
Phys. Chem. Chem. Phys., 20[12] (2018) pp.7962-7967  
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
  
25. Vibration analysis of hydrogen, deuterium and tritium in metals: consequences on the isotope effect ..... 341  
J. Phys.: Condens. Matter, 30[33] (2018) Art. No. 335402  
Natacha Bourgeois, Jean-Claude Crivello, Pierre Cenedese,  
Valérie Paul-Boncour, Jean-Marc Joubert
  
26. Fast Diffusion of Multivalent Ions Facilitated by Concerted Interactions in Dual-Ion Battery Systems ..... 351  
Adv. Energy Mater., 8[27] (2018) Art. No. 1801475  
Hongyi Li, Norihiko L. Okamoto, Takuya Hatakeyama, Yu Kumagai,  
Fumiyasu Oba, Tetsu Ichitsubo
  
27. Effect of Fluorination on Friction Forces between Concentrated Polymer Brushes in the Dry State: All-atom Molecular Dynamics Simulation Study ..... 359  
Chem. Lett., 47[6] (2018) pp.784-786  
Shuichi Uehara, Zhongmin Liu, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa,  
Momoji Kubo

28. Gate-dependent vacancy diffusion in graphene .....362  
Phys. Rev. B, 98[7] (2018) Art. No. 075439  
Rohit Babar, Mukul Kabir
29. Effect of Cyano Substitution on the Step-Edge Adsorption of Copper Phthalocyanine on Au(111) .....371  
J. Phys. Chem. C, 122[22] (2018) pp.11848-11854  
Rejaul Sk, Srilatha Arra, Barun Dhara, Joel S. Miller, Mukul Kabir,  
Aparna Deshpande
30. Large enhancement of superconductivity in Zr point contacts .....378  
J. Phys.: Condens. Matter, 30[25] (2018) Art. No. 255002  
Mohammad Aslam, Chandan K Singh, Shekhar Das, Ritesh Kumar, Soumya Datta,  
Soumyadip Halder, Sirshendu Gayen, Mukul Kabir, Goutam Sheet
31. Analysis of Tip Stability in Adhesion Process in AFM Using Potential Energy Surface:  
Stability Versus Dissipation .....384  
e-J. Surf. Sci. Nanotech., 16 (2018) pp.132-136  
Yasuhiro Senda

<2019 年>

1. Feasible transformation of  $\text{MgCo}_2\text{O}_4$  from spinel to defect rocksalt structure under electron irradiation ..... 389  
Scr. Mater., 167 (2019) pp.26-30  
Norihiko L. Okamoto, Kohei Shimokawa, Hiroshi Tanimura, Tetsu Ichitsubo
2. Large-Scale Micromagnetics Simulation of Magnetization Dynamics in a Permanent Magnet during the Initial Magnetization Process ..... 394  
Phys. Rev. Applied, 11[1] (2019) Art. No. 014010  
Hiroshi Tsukahara, Kaoru Iwano, Tadashi Ishikawa, Chiharu Mitsumata, Kanta Ono
3. Difluoroboron Chelation to Quinacridonequinone: A Synthetic Method for Air-Sensitive 6,13-Dihydroxyquinacridone via Boron Complexes ..... 402  
Chem. Asian J., 14[9] (2019) pp.1452-1456  
Koichiro Moriya, Ryohei Shimada, Katsuhiko Ono
4. A theoretical exploration of the intermolecular interactions between resveratrol and water: a DFT and AIM analysis ..... 407  
J. Mol. Model., 25[3] (2019) Art. No. 56  
A. Suvitha, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, Y. Kawazoe
5. Strength Properties of Concrete Made with Granular Material ..... 418  
ACI Mater. J., 116[1] (2019) pp.147-153  
R. Sakurada, K. Terui, M. Miyamoto, A. Ferrari, N. Sasaki, A. Ishii
6. Simultaneous Prediction of the Energies of  $Q_x$  and  $Q_y$  Bands and Intramolecular Charge-Transfer Transitions in Benzoannulated and Non-Peripherally Substituted Metal-Free Phthalocyanines and Their Analogues: No Standard TDDFT Silver Bullet Yet ..... 425  
J. Phys. Chem. A, 123[1] (2019) pp.132-152  
Rodion V. Belosludov, Dustin Nevenon, Hannah M. Rhoda, Jared R. Sabin, Victor N. Nemykin

7. Failure mode in first-principles computational tensile tests of grain boundaries: effects of a bulk-region size, dominant factors, and local-energy and local-stress analysis .....446  
 J. Phys.: Condens. Matter, 31[9] (2019) Art. No. 095001  
 Hao Wang, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, JinKai Wang, Ying Chen
  
8. Grain-boundary segregation of 3d-transition metal solutes in bcc Fe: *ab initio* local-energy and d-electron behavior analysis ..... 456  
 J. Phys.: Condens. Matter, 31[11] (2019) Art. No. 115001  
 Zhuo Xu , Shingo Tanaka, Masanori Kohyama
  
9. Interfacial properties of penta-graphene-metal contacts ..... 470  
 J. Appl. Phys., 125[6] (2019) Art. No. 065308  
 Arzoo Hassan, Yaguang Guo, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe, Puru Jena
  
10. Aging Degradation Characteristics and Long-Term Performance of Structural Materials for Energy Conversion Systems ..... 477  
 CORROSION, 75[3] (2019) pp.254-266  
 Xiangyu Zhong, Zihao Wang, Fethi Hamdani, Jian Xu, Nishith Kumar Das, Yoichi Takeda, Tetsuo Shoji
  
11. Adsorption of water on fluorinated graphene ..... 490  
 J. Phys. Chem. Solids, 124 (2019) pp.54-59  
 Yong Yang, Fuchi Liu, Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Atomic interactions in C15 Laves phases ..... 496  
 J. Mater. Sci., 54[6] (2019) pp.4742-4753  
 J.-C. Crivello, J.-M. Joubert, T. Mohri
  
13. Anisotropic Lattice Vibration, Motion of Atoms, and Local Structure in Pure Zirconia Crystals with Vacancies ..... 508  
 J. Phys. Soc. Jpn., 88[5] (2019) Art. No. 054801  
 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri

14. Large-scale spin-polarized DFT calculation of electronic properties of GaAs with defects · 515  
Mater. Res. Express, 6[5] (2019) Art. No. 055914  
Mary Clare Escaño, Tien Quang Nguyen, Yu Osanai, Hideaki Kasai,  
Masahiko Tani
15. Subatomic-scale resolution with SPM: Co adatom on  $p(2 \times 1)\text{Cu}(110):\text{O}$  ······ 523  
Nanotechnology, 30[9] (2019) Art. No. 095703  
R Turanský, K Palotás, J Brndiar, Y J Li, Y Sugawara, I Štich
16. Many-Body Quantum Monte Carlo Study of 2D Materials: Cohesion and Band Gap in  
Single-Layer Phosphorene ······ 530  
Phys. Rev. X, 9[1] (2019) Art. No. 011018  
T. Frank, R. Derian, K. Tokár, L. Mitas, J. Fabian, I. Štich
17. Ferromagnetism in nitrogen-doped graphene ······ 538  
Phys. Rev. B, 99[11] (2019) Art. No. 115442  
Rohit Babar, Mukul Kabir
18. Exciton in phosphorene: Strain, impurity, thickness, and heterostructure ······ 549  
Phys. Rev. B, 99[4] (2019) Art. No. 045432  
Srilatha Arra, Rohit Babar, Mukul Kabir
19. Computational model for friction force microscopy: stick-slip motion and thermal energy  
on surface ······ 558  
Appl. Phys. Express, 12[4] (2019) Art. No. 045505  
Yasuhiro Senda

### III. 国際会議発表論文

#### < Proceeding >

1. FIRST-PRINCIPLES STUDY OF ATOMIC HYDROGEN AND OXYGEN  
ADSORPTION ON DOPED-IRON NANOCLUSTERS .....563  
Proceedings of the 24th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE24)  
Vol. 1 (2016), Paper No. ICONE24-60516, pp. V001T03A015; 6 pages  
2016 24th International Conference on Nuclear Engineering  
Nishith K. Das, T. Shoji

<2018 年>

1. Anharmonicity and Hydrogen-Bonded Network Observed by Terahertz Spectroscopy ... 569  
Energy Materials and Nanotechnology (EMN) Meeting on Terahertz  
Amsterdam, Netherlands(2018.4.16-20) No.A22 (Invited)  
Masae Takahashi
2. XAFS study for formation mechanism of nanoparticles in supercritical water ..... 570  
The 12th International Symposium on Supercritical Fluids  
Antibes, France(2018.4.22-25)  
Akira Yoko, Yoshito Oshima, Tadafumi Adschiri
3. INFRARED PHOTODISSOCIATION SPECTROSCOPY OF CLUSTER COMPLEXES  
 $Co_m^+He_n$  ..... 578  
Asian Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2018  
"Fundamentals and applications of Nanoclusters and Nanoparticles"  
Tokyo, Japan(2018.5.12-14) No.p13 (Poster)  
Masahiko Ichihashi, Hideho Odaka
4. First-principles calculation of oxygen self-diffusion in Zirconia ..... 579  
CALPHAD XLVII  
Querétaro, México(2018.5.27-6.1)  
Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang, Tetsuo Mohri
5. Thermodynamic and Dynamic Stability of  $ThMn_{12}$ -type Permanent Magnets ..... 580  
CALPHAD XLVII  
Querétaro, México(2018.5.27-6.1)  
A. Saengdeejing, Y. Chen
6. Exploring first principles-based phase diagrams using a modified CALPHAD approach ... 581  
CALPHAD XLVII  
Querétaro, México(2018.5.27-6.1)  
T. Davey, N-D. Tran, Y. Chen



7. Formation and Infrared Photodissociation Spectroscopy of Cluster Complexes  $Co_m^+He_n$  ·· 582  
 The second International Bunsen Discussion Meeting "Gas Phase Model Systems for Catalysis - GPMC 2018"  
 Ulm, Germany(2018.6.18-20) No.HT16 (Oral)  
 Masahiko Ichihashi, Hideho Odaka
  
8. Full first-principles calculation of oxygen self-diffusion and thermal expansion in Zirconia·········· 583  
 2018 International Conference of Multi-scale Modeling and Simulation of Materials (ICM<sup>3</sup>-2018)  
 Xi'an, China(2018.7.1-5) (Invited)  
 Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang, Tetsuo Mohri
  
9. Infrared Photodissociation Spectroscopy of Cluster Complexes  $Co_m^+He_n$  —Low-lying Electronic States and Reactivity of Cobalt Cluster Ions·········· 584  
 ISSPIC XIX - International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
 Hangzhou, China(2018.8.12-17) No.B27 (Poster)  
 Masahiko Ichihashi, Hideho Odaka
  
10. New structure prediction of novel carbon phases based on a multi-start local search approach·········· 585  
 International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2018  
 Daejeon, Korea(2018.8.19-24)  
 Hiroshi Mizuseki, Babu Ram
  
11. Role of guest-host and guest-guest interactions in selective gas adsorption in MOF materials: Theoretical aspects ··········· 586  
 256th ACS National Meeting  
 Boston, USA(2018.8.19-23) (Oral)  
 Rodion Belosludov

12. Functional nanomaterials for energy and medical applications: Theoretical aspects...587  
 Single Nanostructures, Nanomaterials, Aerogels and their Interactions: Combining  
 Quantum Physics and Chemistry, International Workshop (CPQC18)  
 Dresden, Germany(2018.8.26-31)  
 Rodion Belosludov
13. First-principles analysis of stability in RFe<sub>12</sub>-based compounds.....589  
 2018 Rare Earth Permanent Magnets and Advanced Magnetic Materials and Their  
 Applications (REPM 2018)  
 Beijing, China(2018.8.26-30) No.O25-A0698 (Oral)  
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing
14. AB INITIO STUDY ON HYDRAULIC ACTIVITY OF BELITE .....590  
 43rd Conference on Our World in Concrete & Structures  
 Singapore(2018.8.30-31) (Oral)  
 R. Sakurada, M.Uzawa, Y. Hosokawa, Y. Kawazoe, A. K. Singh
15. Gas storage and separation in nanoporous materials: Role of interaction between  
 adsorbed gas molecules.....596  
 ACCMS-Theme Meeting on “Multiscale Modelling of Materials for Sustainable  
 Development”  
 Hanoi, Vietnam(2018.9.7-9) No.MES16 (Invited)  
 Rodion Belosludov
16. Proton Tunneling Detected in Cesium Silicate Compound LDS-1 .....597  
 43rd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves  
 (IRMMW-THz)  
 Nagoya, Japan(2018.9.9-14) No.We-A2-R1-6 (Oral)  
 H. Matsui

17. Theoretical aspects in realization of functional nanomaterials for energy and medical applications ..... 599  
 Russia-Japan Joint Seminar "Non-equilibrium processing of materials: experimental and modeling"  
 Novosibirsk, Russia(2018.10.1-3)  
 Rodion Belosludov
18. Perpendicular magnetic anisotropy enhancement of an Fe(001) surface by Co-phthalocyanine molecule ..... 600  
 ACSIN-14&ICSPM 26  
 Sendai, Japan(2018.10.21-25) No.23P162 (Poster)  
 Emi Minamitani, Shinji Miwa, Yoshio Miura
19. First-Principles Study of Grain-Boundary Segregation of 3d-Transition Metal Solutes in bcc Fe: Local-Energy Analysis ..... 601  
 International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity, APCP2018  
 Tokyo, Japan(2018.10.25-27)  
 Zhuo Xu, Shingo Tanaka, Masanori Kohyama
20. Molecular Dynamics Simulation Study on the Structure, Role, and Formation Mechanism of Tribofilms of Silicon-Based Materials in Water ..... 602  
 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling  
 Osaka, Japan(2018.10.28-2) (Oral)  
 Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Naoki Takahashi, Koshi Adachi, Momoji Kubo
21. Coarse-Grained Molecular Dynamic Simulation on the Wear Mechanism of Polymer Brush with Different Chain Topologies ..... 603  
 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling  
 Osaka, Japan(2018.10.28-2) (Oral)  
 Zhongmin Liu, Shuichi Uehara, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo

22. Voltage Dependence of Ni-Li Electrode on its Composition and Structure: A Density Functional Theory Study ..... 604  
 The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations  
 Daejeon, Korea(2018.10.29-31) No.PO-72 (Poster)  
 Wei Liu, Koji Shimizu, Emi Minamitani, Yasunobu Ando, Ryota Shimizu,  
 Yuki Watanabe, Susumu Shiraki, Taro Hitosugi, Satoshi Watanabe
23. Construction of Neural Network Potential to Study Li-Ion Distribution near Au(111)/Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> Interface ..... 605  
 The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations  
 Daejeon, Korea(2018.10.29-31) No.PO-96 (Poster)  
 Koji Shimizu, Wei Liu, Wenwen Li, Yasunobu Ando, Emi Minamitani,  
 Satoshi Watanabe
24. Molecular Dynamics Simulation Study on Tribolayer Formation of Silicon-Based Ceramics in Water Lubrication System ..... 606  
 Summit of Materials Science 2018: SMS2018  
 Sendai, Japan(2018.10.29-30) No.P77 (Poster)  
 Y. Ootani, J. Xu, N. Takahashi, M. Kubo
25. À la découverte de nouveaux hydrures métalliques par des méthodes de calcul DFT massif et d'apprentissage automatisé (machine learning) ..... 607  
 Conférence MATERIAUX 2018  
 Strasbourg, France(2018.11.19-23) (Keynote)  
 Jean-Claude Crivello, Asma Noura, Natacha Bourgeois, Asma Atamna,  
 Nataliya Sokolovska, Jean-Marc Joubert
26. Construction of Neural Network Potential to Study Ion Migration under Applied Voltages ..... 609  
 2018 Materials Research Society Fall Meeting & Exhibit  
 Boston, USA(2018.11.25-30)  
 T. Moriya, W. Li, K. Shimizu, E. Minamitani, S. Watanabe

27. Theoretical study on polymorphic transformations in amorphous ice.....610  
2018 Materials Research Society Fall Meeting & Exhibit  
Boston, USA(2018.11.25-30)  
Rodion Belosludov, Kirill Gets, Ravil Zhdanov, Vladimir Belosludov,  
Yoshiyuki Kawazoe

<2019 年>

1. Theoretical study on structure, electronic properties and catalytic activities of TiO<sub>2</sub> nanoparticles ..... 611  
Chemical Reactions at Surfaces Gordon Research Conference  
Ventura, USA(2019.2.17-22)  
R. V. Belosludov
  
2. First-Principles Local-Energy and Local-Stress Schemes to Understand and Design Micro-Structures of Structural Materials ..... 612  
The 1st R-CCS International Symposium  
Kobe, Japan(2019.2.18-19) No.42 (Poster)  
Masanori Kohyama, Zhuo Xu, Shingo Tanaka
  
3. From Clusters To Cluster Complexes ..... 613  
APS March Meeting 2019  
Boston, USA(2019.3.4-8) No.B32.00002 (Invited)  
Masahiko Ichihashi, Hideho Odaka
  
4. Oxygen Diffusion in Zirconia with Kinetic Monte Carlo ..... 614  
2019 TMS Annual Meeting & Exhibition  
San Antonio, USA(2019.3.10-14) (Oral)  
Thomas Schablitzi, Ying Chen, Tetsuo Mohri
  
5. Theoretical study of gas adsorption/separation in nanoporous materials: Role of guest-host and guest-guest interactions ..... 615  
6th International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials  
Sitges, Barcelona, Spain(2019.3.11-15) No.P2.147 (Poster)  
R. Belosludov

## IV. 予稿集

### <2018年>

1. クラスタ複合体を用いたクラスタ触媒研究の試み— $\text{Co}_m^+\text{He}_n$  の赤外光解離分光 ……………617  
ナノ学会 第16回大会  
東京大学浅野キャンパス武田ホール(2018.5.10-12) No.O-42 (Oral)  
市橋正彦、尾高英穂
2. イオン液体におけるメソ液晶構造形成と動力学的分子シミュレーション ……618  
東京大学物性研究所短期研究会 ガラス転移と関連分野の最先端研究  
東京大学物性研究所 (2018.5.10-12) (Oral)  
芝隼人、彭海龍、久保百司
3. 前周期遷移金属クラスタイオンとメタンとの反応：窒素および炭素原子導入の効果 ……………619  
ナノ学会 第16回大会  
東京大学浅野キャンパス武田ホール(2018.5.10-12) No.1P-16 (Poster)  
平林慎一、市橋正彦
4. テラヘルツ分光スペクトルに観測される分子間振動とその非調和性の第一原理計算による研究 ……………620  
第21回理論化学討論会  
愛知県岡崎市 岡崎コンファレンスセンター(2018.5.15-17) No.1L04 (Oral)  
高橋まさえ
5. 粉末特性が粉末床形成プロセスに及ぼす影響に関する離散要素法解析 ……………621  
粉体粉末冶金協会平成30年度春季大会  
京都大学 百周年時計台記念館(2018.5.14-16) No.2-38A (Oral)  
菊池圭子、Zho Weiwei、野村直之、川崎亮
6. 粉末床溶融結合法におけるチタン粉末流動性評価 ……………622  
粉体粉末冶金協会平成30年度春季大会  
京都大学 百周年時計台記念館(2018.5.14-16) No.1-27A (Oral)  
谷藤優太、菊池圭子、野村直之、川崎亮

7. 架橋がポリマーブラシの摩耗に及ぼす影響に関する 粗視化分子動力学シミュレーション .....623  
 トライボロジー会議 2018 春東京  
 東京都渋谷区 国立オリンピック記念青少年総合センター(2018.5.21-23)  
 No.D29 (Oral)  
 劉仲民、上原周一、許競翔、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司
  
8. 水潤滑下における炭化ケイ素と窒化ケイ素のなじみ過程の違い：第一原理分子動力学シミュレーション解析 .....625  
 トライボロジー会議 2018 春東京  
 東京都渋谷区 国立オリンピック記念青少年総合センター(2018.5.21-23)  
 No.D35 (Oral)  
 大谷優介、中村文哉、久保百司
  
9. キセノン吸蔵したナノ細孔中水分子ケージのプロトン伝導 .....627  
 日本固体イオニクス学会第 21 回超イオン導電体物性研究会  
 茨城県東海村 いばらき量子ビーム研究センター(2018.6.1-2) (Oral)  
 佐々木智崇、田所誠、松井広志
  
10.  $\text{Cs}_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$  における局在したプロトンの振動状態 .....631  
 日本固体イオニクス学会第 21 回超イオン導電体物性研究会  
 茨城県東海村 いばらき量子ビーム研究センター(2018.6.1-2) (Oral)  
 島谷和紀、池本夕佳、松尾康光、松井広志
  
11. 第一原理計算によるビーライトの水和活性評価 .....635  
 太平洋セメント研究報告  
 千葉県佐倉市(2018.7.30)  
 細川佳史、桜田良治、川添良幸、鶴澤正美、A. MANJANATH、A. K. SINGH
  
12. 積層鋼板を用いた多極電磁石の磁場分布シミュレーション計算 .....644  
 第 15 回日本加速器学会年会  
 新潟県長岡市 ハイブ長岡(2018.8.7-10) No.WEP070 (Oral)  
 西森信行、深見健司、渡部貴宏



13. 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… 647  
日本物理学会 2018 年秋季大会  
同志社大学京田辺キャンパス(2018.9.9-12) (Oral)  
高橋まさえ、岡村暢之、丁小萌
14. 鉄粒界への 3d 遷移金属元素の偏析の第一原理計算：磁性と機械的性質への効果……………648  
日本物理学会 2018 年秋季大会  
同志社大学京田辺キャンパス(2018.9.9-12) (Oral)  
徐卓、香山正憲、田中真悟、椎原良典
15. ケイ素セラミックスの摩擦界面で自己形成する潤滑膜の分子動力学計算解析…… 649  
第 12 回分子科学討論会  
福岡国際会議場(2018.9.10-13) No.4C13 (Oral)  
大谷優介、許競翔、高橋直己、足立幸志、久保百司
16. 炭素、窒素、酸素添加によるタングステンクラスターイオンのメタン活性化能の向上……………651  
第 12 回分子科学討論会  
福岡国際会議場(2018.9.10-13) No.4B13 (Oral)  
平林慎一、市橋正彦
17. 分子吸着コバルトクラスターイオンのヘリウムクラスターへの挿入—クラスター触媒の分光測定へ向けて……………653  
第 12 回分子科学討論会  
福岡国際会議場(2018.9.10-13) No.2P070 (Poster)  
尾高英穂、市橋正彦
18.  $ZrO_2$  の酸素原子の自己拡散係数と熱膨張の完全第一原理計算……………655  
日本金属学会 2018 年秋期講演大会  
東北大学川内北キャンパス(2018.9.19-21) No.179 (Oral)  
陳迎、王蕾、毛利哲夫

19. Phase Stability Study of NdFe<sub>12</sub> and SmFe<sub>12</sub> Compound: Thermodynamic, Electronic and Dynamic Stability from First-principles.....656  
日本金属学会 2018 年秋期講演大会  
東北大学川内北キャンパス(2018.9.19-21) No.S7.22 (Oral)  
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
20. CeO<sub>2</sub> の極微粒子化による酸素吸放出特性の変化 —セリウム酸化物クラスターと CO および NO との反応— .....657  
第 122 回触媒討論会  
北海道教育大学函館校(2018.9.26-28) No.1H09 (Oral)  
市橋正彦、平林慎一
21. The second phase stability calculation in the Cu-Ti alloy by density functional theory.....658  
日本銅学会第 58 回講演大会  
東京理科大学野田キャンパス(2018.11.2-4) (Oral)  
Eun-Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Ki-Nyung Huh, Mina Jo,  
Kwangho Kim, Byungchan Han, Satoshi Semboshi
22. セメントクリンカーの水和活性向上のための物性予測技術の開発 .....660  
第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会  
東京都品川区 THE GRAND HALL(2018.11.2) No.C-2 (Poster)  
桜田良治、鷺澤正美、細川佳史、川添良幸、Abhishek Kumar Singh
23. キナクリドンキノンハウ素 錯体の構造及びその応用 .....661  
第 49 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会  
名古屋大学(2018.11.3-4) No.1D03 (Oral)  
森谷晃一郎、島田涼平、小野克彦
24. 計算科学と実験による  $\alpha$  型チタンの高温表面酸化機構とシリコン添加の効果の  
解明 .....662  
第 56 回高温強度シンポジウム  
沖縄県石垣市 石垣市商工会館研修室(2018.12.6-7) No.24 (Oral)  
佐原亮二、S. K. Bhattacharya、鈴木聡、上田恭介、成島尚之

25. Au(111)/Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>界面における Li イオン分布の解析に向けたニューラルネットワークポテンシャルの構築 .....664  
第 44 回固体イオニクス討論会  
京都大学吉田キャンパス(2018.12.5-7) No.3A-06 (Oral)  
清水康司、Wei Liu、Wenwen Li、安藤康伸、南谷英美、渡邊聡
26. Ni-Li 系における電圧の組成・構造依存性の第一原理計算 .....666  
第 44 回固体イオニクス討論会  
京都大学吉田キャンパス(2018.12.5-7) No.3B-11 (Oral)  
劉偉、清水康司、南谷英美、安藤康伸、白木将、清水亮太、渡邊佑紀、  
一杉太郎、渡邊聡
27. Xe 水和物により抑制された水ナノチューブのプロトン伝導 .....668  
第 44 回固体イオニクス討論会  
京都大学吉田キャンパス(2018.12.5-7) No.1C-06 (Oral)  
松井広志、佐々木智崇、佐久間惇、田所誠
28. Molecular Dynamics Simulation Study on Friction and Wear Mechanism of Polymer Brush .....670  
第 28 回 日本 MRS 年次大会  
福岡県北九州市 北九州国際会議場(2018.12.18-20) No.2944 (Oral)  
M. Kubo, S. Uehara, Z. Liu, N. Miyazaki, J. Xu, Y. Higuchi, Y. Ootani,  
N. Ozawa
29. Grain-Boundary Segregation of 3d-Transition Metal Solutes in bcc Fe: *Ab Initio* Local-Energy Approach .....671  
第 28 回 日本 MRS 年次大会  
福岡県北九州市 北九州国際会議場(2018.12.18-20) No.2453 (Oral)  
Z. Xu, S. Tanaka, M. Kohyama

<2019 年>

1. Supercritical hydrothermal synthesis of composite metal oxide nanoparticles and theoretical insight into the nanostructure and formation mechanism .....672  
第 57 回セラミックス基礎科学討論会  
宮城県仙台市 仙台国際センター(2019.1.16-17) No.2E10  
横哲、梅澤直人、大野隆央、大島義人、阿尻雅文
2. Au(111)/Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> の界面構造探索に向けたニューラルネットワークポテンシャルの構築 .....673  
第 66 回応用物理学会春季学術講演会  
東京工業大学大岡山キャンパス(2019.3.9-12) No.9a-W321-3 (Oral)  
清水康司、Wei Liu、Wenwen Li、安藤康伸、南谷英美、渡邊聡
3. 微量成分で置換したビーライトの水分子吸着エネルギー .....674  
平成 30 年度土木学会東北支部技術研究発表会  
東北大学川内北キャンパス(2019.3.12) No.V-11 (Oral)  
桜田良治、細川佳史、川添良幸、鶴澤正美、Abhishek Kumar Singh
4. Co 酸窒化物クラスターイオンの He クラスターへの取り込みとクラスター複合体の近赤外光解離分光 .....676  
日本物理学会 第 74 回年次大会  
九州大学伊都キャンパス(2019.3.14-17) No.17aK201-6 (Oral)  
尾高英穂、市橋正彦
5. Assessment of the VDW interaction converting a zwitterionic sulfobetaine monomer from the thermal-motion form to the hydrogen-bonded form .....677  
日本化学会 第 99 春季年会  
甲南大学岡本キャンパス(2019.3.16-19) No.2B3-16 (Oral)  
Masae Takahashi, Shou Kikuchi
6. 粉末床溶融結合法におけるチタン合金粉末の流動性評価 .....678  
日本金属学会 2019 年春期講演大会  
東京電機大学東京千住キャンパス(2019.3.20-22) No.248 (Oral)  
菊池圭子、谷藤優太、Weiwei Zhou、野村直之、川崎亮

7. Theoretical study of Si clathrate/c-Si interface .....679  
日本金属学会 2019 年春期講演大会  
東京電機大学東京千住キャンパス(2019.3.20-22) No.S4.7 (Oral)  
Rodion V. Belosludov、森戸春彦
  
8. Incorporation of Short-Range Correlations within the Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics Model .....680  
日本金属学会 2019 年春期講演大会  
東京電機大学東京千住キャンパス(2019.3.20-22) No.200 (Oral)  
山田亮、毛利哲夫
  
9. Thermodynamic Stability of Alloying Elements in NdFe<sub>12</sub> and SmFe<sub>12</sub> using Special Quasirandom Structures .....681  
日本金属学会 2019 年春期講演大会  
東京電機大学東京千住キャンパス(2019.3.20-22) No.194 (Oral)  
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen

## V. 新聞記事

### <2018年>

1. 原子レベルで高精度予測 NIMS がモデル開発  
日刊産業新聞 (2018.5.18)
2. 協奏的動きがもたらす多価イオン拡散の促進現象を発見 ーリチウムイオン蓄電池よりも性能の高い次世代蓄電池の開発促進に期待ー  
東北大学プレスリリース (2018.8.8)
3. Fe-Ga 単結晶の板材の低コスト量産製造技術を確立 電池を代替する振動発電デバイスの大幅コスト低減が実現、各分野の IoT 実用化が加速  
東北大学プレスリリース (2018.10.15)

## 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…………… 683
2. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 684
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図…………… 685