

2013 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

(2013 年 4 月～2014 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. Graphene-like Topological States of Ultra-thin Bi(110) Films..... 1
National University of Singapore Lu Yunhao
Zhejiang University Lu Yunhao
2. Magnetic and Charge Doping into Topological Insulators with Nonmagnetic Dopants 3
National University of Singapore Shen Lei
3. Designing Metal-Graphene Complexes for Electronic, Spintronic, and Catalytic Applications 5
Hung M. Le, Yoshiyuki Kawazoe
4. 異種の微量元素を介在した Belite(β -C₂S)結晶の安定性とフォノン特性 9
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 R. V. Belosludov
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 Abhishek Kumar Singh

5. *Ab initio* Post Hartree-Fock Computational Chemistry Studies of Graphene and Water Clathrate Systems 11
 IMR, Tohoku University Michael R. Philpott
 Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry,
 Chemistry Department,
 University of California Berkeley Michael R. Philpott
6. 鉄合金およびジルコニウム合金の照射損傷過程 16
 東北大学金属材料研究所 佐藤 裕樹, 阿部 弘亨, 松永 哲也,
 松川 義孝, 阿部 友紀, 木下 詩織, 俵 京佑
7. Stability of Modified Silicide/silicon Interfaces in SB-MOSFETs: An *Ab-initio* Study... 19
 Pooja Srivastava, Kwang-Ryeol Lee and Seungchul Kim
8. Phononic Properties of Bottom-up Type Self-assembled Materials from Computer Simulation
 Korea Institute of Science and Technology Kahyun Hur
9. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による新規水素貯蔵材料の開発 23
 独立行政法人 物質・材料研究機構 佐原 亮二
 Korea Institute of Science and Technology 水関 博志
 Delft University of Technology M. H. F. Sluiter
 横浜国立大学 大学院工学研究院 大野 かおる
 東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添 良幸
10. 表面近接配置有機分子の発光機構に及ぼす周囲電磁場環境探索 25
 独立行政法人 物質・材料研究機構 根城 均
 東北大学 工学研究科 池庄司 民夫
 東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
 東京工業大学 環境エネルギー機構 尾上 順
 滋賀県立大学 工学部 奥 健夫, 鈴木 厚志
 東京工業大学 理工学研究科 高嶋 明人, 増田 秀樹
 山梨大学 小林 潔, 堀 裕和
 早稲田大学 小笠原 義仁

11. Initial Stage of Silicon Oxynitride Growth by NO on Si(100)2x1 Surface using Molecular Dynamics Simulation.	27
Korea Institute of Science and Technology Haining Cao	
12. カノニカルセルタイリングの作製アルゴリズムの開発	29
東北大学・多元物質科学研究所 藤田 伸尚	
13. 球形微粒子の自己組織化シミュレーション.....	31
東北大学・工学研究科材料システム工学専攻 菊池 圭子	
14. 鉄中の溶質原子間相互作用	34
大阪府立大学工学研究科 沼倉 宏, Souissi Maaouia	
独立行政法人 科学技術振興機構 沼倉 宏, Souissi Maaouia	
15. 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	38
産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 宮本 良之	
16. Hydrogen Adsorption on Metallic Cluster: An <i>Ab-initio</i> Study	42
Korea Institute of Science and Technology K. P. S. S. Hembram,	
Kwang-Ryeol Lee, Sang Soo Han	
17. Pressure Induced Phase Behaviors of Ta ₂ O ₅ Nanowire and Coesite Single Crystal.....	43
School of Physics, Astronomy and Computational Science,	
George Mason University Q.Y. Hu, H.W. Sheng	
WPI Advanced IMR, Tohoku University T. Fujita	
18. Catalytically Active Single-atom Niobium in Graphitic Layers.....	45
School of Materials Science and Engineering, Dalian University of	
Technology Xuefeng Zhang, Chunjing Liu, Hao Huang, Fanghong Xue,	
Xinglong Dong	
Materials Science and Technology Division Junjie Guo, Stephen J. Pennycook,	
Matthew F. Chisholm	
Department of Materials Science and Engineering, Johns Hopkins University	
Pengfei Guan	
Beijing Computational Science Research Center Pengfei Guan	

19. Hybrid Functional and GW Approximation Studies of the Electronic Structure of Bulk and Defective Li_2O_2 47
 WPI Advanced IMR, Tohoku University L. J. Kang, C. Li, T. Fujita, M.W. Chen
20. Theoretical Elucidation on Behavior of Li^+ and O_2^- in Ionic Liquid..... 52
 WPI Advanced IMR, Tohoku University Sunho Jung, Kazuto Akagi
21. 原子力関連材料の計算科学的研究
 Computer Simulation Study on Nuclear Materials 54
 東北大学 金属材料研究所 小無 健司, 八登 唯夫, 川尻 優美
22. ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション .. 56
 名古屋工業大学 大学院 尾形 修司, 河野 貴久, 鍛島 康裕
 豊田中央研究所 大庭 伸子
 東京大学物性研究所 河野 貴久
 デンソー 田中 宏一
23. 水素化物の計算材料科学 58
 東北大学 金属材料研究所 高木 成幸, 佐藤 豊人, 関 大輔, 松尾 元彰,
 李 関喬, 折茂 慎一
 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 池庄司 民夫, 宇根本 篤,
 折茂 慎一
24. 電池材料の第一原理シミュレーション..... 61
 東北大学 金属材料研究所 池庄司 民夫
 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 池庄司 民夫
25. 液体シリコンプロセスに対する計算科学的研究 67
 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 今村 光良, 本郷 研太,
 前園 涼
26. Controlling the Work Function of Transparent Conducting Oxide (TCO) using Organic Molecule Adsorption..... 74
 Korea Institute of Science and Technology Keunsu Choi, Hiroshi Mizuseki

27. Simulation on Axisymmetric Thermocapillary Interaction of Two Bubbles Using Hybrid Lattice Boltzmann Method 75
 Department of Engineering Mechanics, Chongqing University Zhong Zeng,
 Haiqiong Xie, Liangqi Zhang
 IMR, Tohoku University Yuui Yokota, Akira Yoshikawa
 New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
28. 太陽電池用シリコン結晶における多結晶組織が応力分布に与える影響の解明 78
 東北大学 金属材料研究所 沓掛 健太郎、大野 裕、徳本 有紀、米永 一郎
 名古屋大学 大学院工学研究科 宇佐美 徳隆、松島 悟、
 Joonwichien Supawan
29. 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発 80
 産業技術総合研究所 コビキタスエネルギー研究部門 香山 正憲,
 Vikas Sharma, 田中 真悟
30. Theoretical Study on Gas Storage and Separation in Nanopores Materials 85
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS R. K. Zhdanov, Y. Y. Bozhko,
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
 Korea Institute of Science and Technology H. Mizuseki
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
31. Numerical Simulation of the Band Structure of Complex Fluorides for the Development of Energy-Saving Vacuum Ultraviolet Light Sources 89
 Institute of Natural and Mathematical Sciences, Massey University
 Marilou Cadatal-Raduban
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 Institute of Laser Engineering, Osaka University Keita Seto, Luong Viet Mui,
 Toshihiko Shimizu, Nobuhiko Sarukura

32. Thermodynamic Properties of Clathrate Hydrates Based on Ice Frameworks 91
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS Y. Y. Bozhko,
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
 IMR, Tohoku University Y. Y. Bozhko, R. V. Belosludov, H. Mizuseki
 NICHe, Tohoku University O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, Y. Kawazoe
 Korea Institute of Science and Technology H. Mizuseki
33. Thermodynamic Properties of Binary Gas Hydrates for Hydrogen Storage 94
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS R. K. Zhdanov,
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
 IMR, Tohoku University R. K. Zhdanov, R. V. Belosludov
 NICHe, Tohoku University O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, Y. Kawazoe
34. Numerical Solution of Casida Equation within TOMBO Approach 98
 IMR, Tohoku University K. V. Vshivkov, R. V. Belosludov
 Institute of Laser Physics, SB RAS, Novosibirsk, Russia K. V. Vshivkov
 NICHe, Tohoku University K. V. Vshivkov, V. R. Belosludov, O. S. Subbotin ,
 Y. Kawazoe
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, V. R. Belosludov,
 O. S. Subbotin
35. サブナノクラスターを基盤とした新物質創製を目指す実験と
 大規模計算の協同 100
 豊田工業大学・クラスター研究室 市橋 正彦, 安松 久登
 東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添 良幸
 韓国科学技術研究院 水関 博志
 独立行政法人 物質・材料研究機構 佐原 亮二
 九州大学 大学院理学研究院 寺寄 亨
36. 紫外・真空紫外透明ガラス材料の開発 101
 大阪大学 レーザーエネルギー学研究中心 清水 俊彦, 猿倉 信彦,
 山ノ井 航平, 瀬戸 慧大, ムイ・ロン・ヴィエト

37. 全電子混合基底第一原理プログラム TOMBO の開発と応用	102
横浜国立大学 大学院工学研究院 大野 かおる, 小野 頌太	
横浜国立大学 大学院工学府 桑原 理一	
アクセルリス(株) 桑原 理一	
独立行政法人 物資・材料研究機構 佐原 亮二	
東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添 良幸	
東北大学 金属材料研究所 Rodion Belosludov	
38. ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルと ダイナミクス	104
横浜国立大学 大学院工学研究院 大野 かおる, 小野 頌太	
横浜国立大学 大学院工学府 桑原 理一	
アクセルリス(株) 桑原 理一	
独立行政法人 物資・材料研究機構 佐原 亮二	
東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添 良幸, 志田 和人	
39. 電子構造計算とマルチスケール・シミュレーションによる物性研究	106
山口大学 大学院理工学研究科 嶋村 修二	
山口大学 メディア基盤センター 赤井 光治,	
山口大学 大学院理工学研究科 仙田 康浩, 今橋 信行, 金平 大輝	
40. 熱間加工された炭素鋼におけるフェライト変態挙動の フェーズフィールドモデリングと実験検証	107
東京農工大学 大学院工学研究院先端機械システム部門 山中晃徳	
41. フラストレートした低次元量子スピン系の磁気励起に関する理論研究	109
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 森 道康	
京都大学 基礎物理学研究所 遠山 貴己	
42. 高温プラズマ閉じ込め実験装置におけるプラズマ・壁相互作用による 水素挙動と材料損傷	111
九州大学 応用力学研究所 徳永 和俊, 荒木 邦明, 藤原 正, 宮本 好雄	
東北大学 金属材料研究所 永田 晋二	
名城大学 理工学部 土屋 文	
核融合科学研究所 時谷 政行	
富山大学 水素同位体科学研究センター 松山 政夫, 阿部 信介	

43. 超伝導ナノ構造の転移温度上昇と磁束構造…………… 112
 大阪府立大学 工学研究科 加藤 勝, 石田 武和, 宍戸 寛明, 東 陽一,
 藤田 憲生
 秋田大学 教育文化学部 林 正彦
 東北大学 教養教育院 海老澤 丕道
 東北大学 金属材料研究所 小山 富男
 独立行政法人 物質・材料研究機構 超伝導物性ユニット 平田 和人
 東京大学 工学系研究科物理 工学専攻 為ヶ井 強
 大阪府立大学工業高等専門学校 佐藤 修
 大阪府立大学 21 機構 野口 悟
 大阪府立大学 地域連携部門 川又 修一
 大阪府立大学 工学部 梅田 政樹
 九州産業大学 工学部 西寄 照和
44. 放射光、中性子実験に向けた強磁場パルスマグネットの開発…………… 113
 東北大学 金属材料研究所 鳴海 康雄
45. 偏極中性子実験のための磁場環境定量評価シミュレーション…………… 116
 東北大学 金属材料研究所 大山 研司, 南部 光江
46. フラストレート磁性体の計算科学的研究…………… 121
 兵庫県立大学 物質理学研究科 中野 博生
47. Direct Molecular Dynamics Simulation of Electrocaloric Effect in
 BaTiO₃ and PbTiO₃…………… 124
 IMR, Tohoku University Takeshi Nishimatsu
 Department of Materials Science and Engineering, Iowa State University
 Jordan A. Barr, S. P. Beckman
48. First-principles Molecular Dynamics Simulations of Water Dissociation in
 Water-bilayer on Pt(322) Stepped Surface…………… 126
 Graduate School of Engineering, Osaka University Hidetoshi Kizaki,
 Hitomi Kanamori, Kouji Inagaki, Yoshitada Morikawa
 National Institute for Materials Science Ikutaro Hamada

49. 生体用 Co-Cr-Mo 合金におけるひずみ誘起マルテンサイト変態と疲労破壊の研究 129
 東北大学 金属材料研究所 小泉 雄一郎, 光延 卓哉, 李 秉洙, 松本 洋明, 李 云平, 黒須 信吾, 千葉 晶彦, 菅原 孝昌
50. 専用スーパーコンピューターを活用した統合マルチスケール材料設計による物理的、化学的性質解明 134
 韓国科学技術研究院 水関博志
51. First-principles Study of the Nd-O in Nd-Fe-B Magnets 136
 Fracture and Reliability Research Institute, Graduate School of Engineering,
 Tohoku University Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
 Department of Materials Science, Graduate School of Engineering,
 Tohoku University Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto
52. Improved Interaction of Hydrogen on Transition-Metal-Doped Al(100) Stepped Surface 141
 Department of Physics, University of Jinan G. Chen
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
53. Substrate Induced Modulation of Electronic Structure of *h*-BN Monolayer 146
 Dept of Materials Science, Indian Association for the Cultivation of Science
 A. H. M. Abdul Wasey, Soubhik Chakrabarty, G. P. Das
 Chemistry Division, Bhabha Atomic Research Centre C. Majumder
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
54. The Intrinsic Ferromagnetism in a MnO₂ Monolayer 151
 Department of Materials Science and Engineering, College of Engineering,
 Peking University Jian Zhou, Qiang Sun
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
55. Computational Design of Nanostructured Materials using Density Functional Theory for Hydrogen Storage 153
 Department of Physics & Nanotechnology, SRM University, Chennai K. Iyakutti
 School of Physics, Madurai Kamaraj University R. Lavanya, V. Vasu
 NICHe, Tohoku University V. J. Surya, Y. Kawazoe

56. Thermodynamic Stability of Ferromagnetic Phases..... 158
 Corporate Sector Research and Advance Engineering, Robert Bosch GmbH
 Alberto Martinez-Limia, Adrien Gola, Lothar Kunz, Thomas Eckl
 Research and Technology Center Asia Pacific, District China, Bosch (China)
 Investment Co., Ltd. Takashi Shigematsu
 National Institute for Materials Science Ryoji Sahara
 IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki
 NICHe Center, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
57. Theoretical Investigation of Metal-Organic Frameworks (MOFs),
 Covalent Organic Frameworks and Organic Dyes for DSC 159
 Faculty of Chemistry, University of Science, Vietnam National University
 Nguyen-Nguyen Pham-Tran, Hung Q. Pham, Thi Nguyen
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
 IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki
 Theory and Modeling Department, Culham Centre for Fusion Energy, United
 Kingdom Atomic Energy Authority Duc Nguyen-Manh
58. Theoretical Studies of Water Interaction with (C₂₀H₂₈N₃O₃) BR and
 (C₂₀H₂₈N₃O₃) NTF₂ Ionic Liquids 166
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS O. S. Subbotin,
 V. R. Belosludov, R. K. Zhdanov
 NICHe, Tohoku University O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, V. J. Surya,
 K. V. Vshivkov, Y. Kawazoe
 IMR, Tohoku University K. V. Vshivkov, R. V. Belosludov
 Institute of Laser Physics, SB RAS K. V. Vshivkov
59. First Principles Investigation on Zigzag Boron Nitride Nanotube 169
 North Carolina State University, Raleigh Prithwish K. Nandi, Jacob Eapen
 Bhabha Atomic Research Center, Brahmananda Chakraborty
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
60. The Intrinsic Metallicity in Three-dimensional Boron Nitride..... 172
 Qian Wang, Shunhong Zhang, Yoshiyuki Kawazoe, Puru Jena

61.	Structures and Phase Transition of a MoS ₂ Monolayer.....	174
	Department of Materials Science and Engineering, College of Engineering, Peking University Qiang Sun NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
62.	Terpyridine–Triarylborane Conjugates for the Dual Complexation of Zinc(II) Cation and Fluoride Anion.....	176
	Department of Chemistry, University of Ulsan Sang Uck Lee	
63.	First Principles Calculations of Thermal Equation of State of Solid Naphthalene.....	185
	Sobolev Institute of Geology and Mineralogy, SB RAS Anna Y. Likhacheva, Sergey V. Rashchenko, Artem D. Chanyshhev, Konstantin D. Litasov Department of Geology and Geophysics, Novosibirsk State University Sergey V. Rashchenko, Artem D. Chanyshhev Konstantin D. Litasov Department of Physics and Technical Science, Gumilyov Eurasian National University Talgat M. Inerbaev Department of Chemistry, University of South Dakota Dmitry S. Kilin	
64.	First Principles Investigation on Interaction of Water with Ionic Liquids.....	191
	NICHe, Tohoku University V. J. Surya, Y. Kawazoe	
65.	The Analytical Expressions by Elements of the Coupling Matrix K of the Casida Equations and Tensor of Dipole Moment within the All-electron Mixed-basis Approach for Cluster.....	196
	Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, K. V. Vshivkov Institute of Laser Physics, SB RAS K. V. Vshivkov NICHe, Tohoku University V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, K. V. Vshivkov , Y. Kawazoe	
66.	New Carbon Allotropes with Helical Chains in all-sp ² Bonding Networks.....	202
	Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences Jian-Tao Wang Department of Physics, University of Nevada Changfeng Chen School of Physics, Peking University Enge Wang NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	

67.	Sources of n-type Conductivity in GaInO ₃	205
	Department of Applied Physics, Xi'an University of Technology V. Wang	
	General Research Institute for Nonferrous Metals W. Xiao	
	Center for Computational Science, Korea Institute of Science and Technology	
	H. Mizuseki	
	NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe	
68.	The Cluster and Performance Characteristic of Complex Metallic Alloys.....	210
	State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology,	
	Yanshan University Bin Wen, Jinglian Du	
	M ² NeT Lab, Wilfrid Laurier University Roderick Melnik	
	NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
	Institute of Thermophysics, SB RAS Yoshiyuki Kawazoe	
69.	<i>Ab initio</i> Simulation on Fe Based Soft Magnetic Amorphous Alloys.....	218
	IMR, Tohoku University Yaocen Wang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino	
	NICHe, Tohoku University Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe	
	Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS Yoshiyuki Kawazoe	
70.	分子系のフント第一則に関する高精度電子状態計算	223
	仙台高等専門学校 丸山 洋平	
71.	<i>Ab-initio</i> Study on Electronic and Transport Properties of Topological Insulators in Nanoscale Sizes	226
	Ahmad Ranjbar, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe	
72.	金属アレルギーにおける抗原ペプチドの新たな同定法の確立.....	230
	東北大学 加齢医学研究所 小笠原康悦	
	千葉大学 医学部 生命情報科学 田村 裕, 菅波 晃子, 高瀬 規男	
	相模原病院 臨床研究センター 鈴木 隆二	
73.	液体から固体への相変化に関する計算機実験による研究	233
	東北大学 金属材料研究所 HPCI 戦略プログラム計算材料科学研究拠点	
	寺田 弥生	
	東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 毛利 哲夫	

74. C₆₀ Film Coated Silicon Anode for Lithium Ion Batteries 236
 Center for Computational Science, Korea Institute of Science and Technology
 Minwoong Joe, Kwang-Ryeol Lee, Hiroshi Mizuseki, Seungchul Kim
 Department of Energy and Materials Engineering, Dongguk University-Seoul
 Minwoong Joe, Young-Kyu Han
75. Development of Mixed-basis *Ab-initio* Calculation Program with
 Dynamical Electron Behavior and its Application to Nanostructured 238
 NICHe, Tohoku University Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe
 Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS Yoshiyuki Kawazoe
76. LiH 分子への陽電子吸着機構における電子-陽電子相関の役割 244
 横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科 立川研究室 小山田隆行
77. Magnetoelectric Effect in Topological Insulator Films Beyond Linear Response
 Regime 248
 IMR, Tohoku University Dashdeleg Baasanjav, Kentaro Nomura,
 Oleg A. Tretiakov
78. 合金相平衡の理論計算 250
 東北大学 金属材料研究所 毛利 哲夫
 大阪大学 譯田真人
 北見工業大学 大橋鉄也
 九州工業大学 飯久保智 東北大学 大谷博司
 鹿児島大学 徳永辰也
 三重大学 中村浩次
 東北大学 山田亮、山田泰徳、珍田祥宏
 WIGNER Research Centre for Physics Laszlo Granasy
 Max Planck Institute Blazej Grabowski
 Inst. of Physics, Slovak Academy of Sciences Ivan Stich
 Cornell University Roald Hoffmann, Huayun Geng

II. 原著論文

<2013 年>

1. A Theoretical Study of The Effects of Transition Metal Dopants
On The Adsorption and Dissociation of Hydrogen on Nickel Clusters 267
Int. J. Quantum Chem. , **113**[15] (2013) pp.1940-1948
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ambigapathy Suvitha,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe[a]
2. Kinetic Origin of Divergent Decompression Pathways in Silicon and Germanium 276
Phys. Rev. Lett., **110**[16] (2013) pp.16550301-16550305
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
3. Novel Electronic and Magnetic Properties of Two-Dimensional
Transition Metal Carbides and Nitrides 281
Adv. Funct. Mater., **23**[17] (2013) pp.2185-2192
Mohammad Khazaei, Masao Arai, Taizo Sasaki, Chan-Yeup Chung,
Natarajan S. Venkataramanan, Mehdi Estili, Yoshio Sakka
and Yoshiyuki Kawazoe
4. Role of Single Walled Carbon Nanotube in Nanophase MgH₂ Hydrogen
Storage System 289
Asian J. Chem., **25**[Supplementary] (2013) pp.S391-S393
K. Iyakutti, R. Lavanya, V. J. Surya, V. Vasu, Y. Kawazoe and H. Mizuseki
5. Investigation of Gas Sensing Property of Single Walled Carbon Nanotube 292
Asian J. Chem., **25**[Supplementary] (2013) pp.S433-S435
K. Iyakutti, V.J. Surya, G. B. Mary, T. Suthan and Y. Kawazoe
6. Interaction of Hydrogen, Oxygen and BH₃ With Graphene-A First
Principles Study 295
Asian J. Chem., **25**[Supplementary] (2013) pp.S436-S438
K. Iyakutti, Y. S. M. Pearses, T. Suthan and V.J. Surya

7. Numerical Simulation of Crucible Rotation in High-Temperature Solution Growth Method using a Fourier-Legendre Spectral Element Method..... 298
 Int. J. Heat Mass Transfer, **64** (2013) pp.882-891
 Huan Mei, Zhong Zeng, Zhouhua Qiu, Liang Li, Liping Yao,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

8. First Principles Electronic Structure of Coincidence Site Epitaxial Ag/Si(111) Interface 308
 Phys. Status Solidi B, **250**[7] (2013) pp.1313-1319
 A. H. M. Abdul Wasey, R. Batabyal, J. C. Mahato, B. N. Dev,
 Y. Kawazoe and G. P. Das

9. Characteristic NMR Spectra of Proton Transfer in Protonated Water Clusters 315
 Chem. Phys., **420** (2013) pp.50-61
 Charoensak Lao-ngam, Mayuree Phonyiem, Sermsiri Chaiwongwattana,
 Yoshiyuki Kawazoe and Kritsana Sagarik

10. Effect of A Nickel Dimer on The Dissociation Dynamics of A Hydrogen Molecule... 327
 RSC Adv., **3**[30] (2013) pp.12307-12312
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter, Kaoru Ohno
 and Yoshiyuki Kawazoe

11. The Intrinsic Ferromagnetism in A MnO₂ Monolayer 333
 J. Phys. Chem. Lett., **4**[20] (2013) pp.3382-3386
 M. Kan, J. Zhou, Q. Sun, Y. Kawazoe and P. Jena

12. Roles of Oxygen Vacancy on Ferromagnetism in Ni Doped In₂O₃:
 A Hybrid Functional Study 338
 J. Magn. Magn. Mater., **348** (2013) pp.55-60
 V. Wang, C.-Y. You, H.-P. He, D.-M. Ma, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

13. A New (2 × 1) Reconstructed Edge Structure of Zigzag Si Nanoribbon:
 First Principles Study..... 344
 J. Chem. Phys., **139**[10] (2013) pp.10470301-10470309
 Rui Li, Jian Zhou, Yang Han, Jinming Dong and Yoshiyuki Kawazoe

14. Long-Range Order of The Three-Sublattice Structure in The S=1 Heisenberg Antiferromagnet on A Spatially Anisotropic Triangular Lattice..... 353
 J. Phys. Soc. Jpn. , **82**[4] (2013) pp.4371501-4371505
 Hiroki Nakano, Synge Todo and Tohru Sakai

15. First-Principles Study on The Dilute Si in Bcc Fe: Electronic and Elastic Properties Up to 12.5 at.%Si 358
 Comput. Mater. Sci., **70** (2013) pp.100-106
 Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Ken Suzuki,
 Hideo Miura and Tetsuo Mohri

16. Excitons and Biexcitons in Symmetric Electron-Hole Bilayers 365
 Phys. Rev. Lett., **110**[21] (2013) pp.21640701-21640705
 Ryo Maezono, Pablo L´opez R´ios, Richard J. Needs and Tetsuo Ogawa

17. Modeling of Fluctuating Interaction Energy Between A Gliding Interstitial Cluster and Solute Atoms in Random Binary Alloys 370
 Philos. Mag., **93**[14] (2013) pp.1652-1676
 Y. Satoh, H. Abe and T. Matsunaga

18. New Carbon Allotropes with Helical Chains of Complementary Chirality Connected by Ethene-Type π -Conjugation 395
 Sci. Rep., **3** (2013) pp.307701-307706
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe

19. First-Principles Modeling of C₆₀-Cr-Graphene Nanostructures for Supporting Metal Clusters 401
 Phys. Chem. Chem. Phys., **15**[44] (2013) pp.19395-19404
 Hung M. Le, Hajime Hirao, Yoshiyuki Kawazoe and Duc Nguyen-Manh

20. Effects of Suboxide Layers on The Electronic Properties of Si(100)/SiO₂ Interfaces: Atomistic Multi-Scale Approach 411
 J. Appl. Phys., **113**[7] (2013) pp.07370501-07370506
 Byung-Hyun Kim, Gyubong Kim, Kihoon Park, Mincheol Shin, Yong-Chae Chung and Kwang-Ryeol Lee

21. Simultaneous Magnetic and Charge Doping of Topological Insulators with Carbon 417
 Phys. Rev. Lett., **111**[23] (2013) pp.23680301-23680305
 Lei Shen, Minggang Zeng, Yunhao Lu, Ming Yang and Yuan Ping Feng
22. Three-Dimensional Metallic Boron Nitride 422
 J. Am. Chem. Soc., **135**[48] (2013) pp.18216-18221
 Shunhong Zhang, Qian Wang Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
23. Catalytic Properties of Near-Surface Alloy of Transition Metal in Aluminum: A Density Functional Theory Study of Structural and Electronic Properties 428
 J. Phys. Chem. C, **117**[47] (2013) pp.25077-25089
 M. M. Zheng, S. J. Li, Y. Su, G. Chen and Y. Kawazoe
24. First Principles Density Functional Investigation of Supported Tungsten Cluster (W_n ; $n = 1$ To 6) on Anchored Graphite(0001) Surface 441
 International Journal of Computational Materials Science and Engineering, **2**[3] (2013) pp.135001501-135001514
 Sonali Barman, G. P. Das and Y. Kawazoe
25. Pressure-Induced Amorphization in Single-Crystal Ta_2O_5 Nanowires: A Kinetic Mechanism and Improved Electrical Conductivity..... 455
 J. Am. Chem. Soc., (2013) pp.13947-13953
 Xujie Lü, Qingyang Hu, Wenge Yang, Ligang Bai, Howard Sheng, Lin Wang, Fuqiang Huang, Jianguo Wen, Dean J. Miller and Yusheng Zhao
26. Catalytically Active Single-Atom Niobium in Graphitic Layers..... 462
 Nat. Commun. , **4** (2013) pp.192401-192407
 Xuefeng Zhang, Junjie Guo, Pengfei Guan, Chunjing Liu, Hao Huang, Fanghong Xue, Xinglong Dong, Stephen J. Pennycook and Matthew F. Chisholm
27. Investigation on Electronic, Mechanical and Thermal Properties of Hf–H System .. 469
 J. Nucl. Mater., **443**[1-3] (2013) pp.99-106
 Hao Wang and Kenji Konashi

28. Multi-Thousand-Atom DFT Simulation of Li-Ion Transfer Through The Boundary Between The Solid-Electrolyte Interface and Liquid Electrolyte in A Li-Ion Battery 477
 J. Phys. Chem. C, **117**[35] (2013) pp.17960-17968
 Shuji Ogata, Nobuko Ohba and Takahisa Kouno
29. Enhanced Heat Transfer Through Filler-Polymer Interface by Surface-Coupling Agent in Heat-Dissipation Material: A Non-Equilibrium Molecular Dynamics Study 486
 J. Appl. Phys., **114**[19] (2013) pp.19351201-19351208
 Kouichi Tanaka, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, Tomoyuki Tamura, Masashi Kitsunezuka and Atsushi Shinma
30. Unusual Sevenfold Coordination of Ru in Complex Hydride Na₃RuH₇: Prospect for Formation of [FeH₇]³⁻ Anion 494
 Appl. Phys. Lett. , **103**[11] (2013) pp.11390301-11390304
 Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Motoaki Matsuo, Toyoto Sato, Hiroyuki Saitoh, Katsutoshi Aoki and Shin-ichi Orimo
31. First-Principles Prediction of Possible Synthesis of Li-Fe Based Complex Hydride Li₄FeH₆ 498
 J. Japan Inst. Met. Mater., **77**[12] (2013) pp.604-608
 Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Toyoto Sato, Katsutoshi Aoki and Shin-ichi Orimo
32. Biased Interface Between Solid Ion Conductor LiBH₄ and Lithium Metal: A First Principles Molecular Dynamics Study 503
 Appl. Phys. Lett. , **103**[13] (2013) pp.13390301-13390304
 Tamio Ikeshoji, Yasunobu Ando, Minoru Otani, Eiji Tsuchida, Shigeyuki Takagi, Motoaki Matsuo and Shin-ichi Orimo
33. Simulation of Self-Assemblies of Colloidal Particles on The Substrate using A Lattice Boltzmann Pseudo-Solid Model 507
 J. Comput. Phys. , **248** (2013) pp.323-338
 Gongyou Liang, Zhong Zeng, Yu Chen, Junya Onishi, Hirotada Ohashi and Shiyi Chen

34. Simulation of Self-Assemblies of Colloidal Particles with Different Sizes
by Using A Lattice Boltzmann Pseudo-Solid Model..... 523
Int. J. Mod. Phys. C, **24**[12] (2013) pp.134000201-134000206
Gongyou Liang, Zhong Zeng, Yu Chen, Hirotada Ohashi and Shiyi Chen
35. The Two-Dimensional S=1/2 Heisenberg Antiferromagnet on The *Shuriken* Lattice
—A Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles—..... 529
J. Phys. Soc. Jpn. , **82**[8] (2013) pp.08370901-08370905
Hiroki Nakano and To[^]ru Sakai
36. Direct Molecular Dynamics Simulation of Electrocaloric Effect in BaTiO₃ 534
J. Phys. Soc. Jpn. , **82**[11] (2013) pp.11460501-11460504
Takeshi Nishimatsu, Jordan A. Barr and Scott P. Beckman
37. Low-Frequency Raman Scattering in A Xe Hydrate..... 538
J. Phys. Chem. B, **117**[36] (2013) pp.10686-10690
S. V. Adichtchev, V. R. Belosludov, A. V. Ildyakov, V. K. Malinovsky,
A. Yu. Manakov, O. S. Subbotin and N. V. Surovtsev
38. Modelling of A Displacive Transformation in Two-Dimensional System within
A Single-Site Approximation of Continuous Displacement Cluster Variation
Method 543
Philos. Mag., **93**[18] (2013) pp.2316-2328
Naoya Kiyokane and Tetsuo Mohri
39. Cluster Variation Method..... 556
JOM, **65**[11] (2013) pp.1510-1522
Tetsuo Mohri
40. Strong Magnetic Coupling in A Magnetically Dilute F-Electron Insulator:
A Dysprosium Boron-Cluster Compound..... 569
J. Appl. Phys., **113**[17] (2013) pp.17E15601-17E15603
T. Mori, R. Sahara, Y. Kawazoe, K. Yubuta, T. Shishido and Y. Grin

<2014 年>

1. Phase Stability, Elastic and Electronic Properties of Cu–Zr Binary System
Intermetallic Compounds: A First-Principles Study 572
J. Alloys Compd., **588** (2014) pp.96-102
Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik and Yoshiyuki Kawazoe
2. Structures and Phase Transition of A MoS₂ Monolayer 579
J. Phys. Chem. C, **118**[3] (2014) pp.1515-1522
M. Kan, J. Y. Wang, X. W. Li, S. H. Zhang, Y. W. Li, Y. Kawazoe, Q. Sun,
and P. Jena
3. Theoretical Investigation of Structures and Compositions of Double Neon-Methane
Clathrate Hydrates, Depending on Gas Phase Composition and Pressure 587
J. Eng. Thermophys., **23**[1] (2014) pp.9-19
Yu. Yu. Bozhko, O. S. Subbotin, V. M. Fomin, V. R. Belosludov
and Y. Kawazoe
4. Theoretical Investigation of Structures, Compositions,
and Phase Transitions of Neon Hydrates Based on Ices I_h and II 598
J. Eng. Thermophys., **23**[1] (2014) pp.20-26
Yu. Yu. Bozhko, O. S. Subbotin, V. M. Fomin, V. R. Belosludov
and Y. Kawazoe
5. Stability and Composition of Helium Hydrates Based on Ices I_h and II at Low
Temperatures 605
J. Phys. Chem. C, **118**[5] (2014) pp.2587-2593
Rodion V. Belosludov, Yulia Y. Bozhko, Oleg S. Subbotin,
Vladimir R. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
and Vasily M. Fomin
6. Engineering of Band Gap in Metal–Organic Frameworks by Functionalizing
Organic Linker: A Systematic Density Functional Theory Investigation 612
J. Phys. Chem. C, **118**[10] (2014) pp.4567-4577
Hung Q. Pham, Toan Mai, Nguyen-Nguyen Pham-Tran, Yoshiyuki Kawazoe,
Hiroshi Mizuseki and Duc Nguyen-Manh

7. Hydrogen Storage in TiO₂ Functionalized (10, 10) Single Walled Carbon Nanotube (Swcnt) - First Principles Study..... 623
 Int. J. Hydrogen Energy, **39**[10] (2014) pp.4973-4980
 R. Lavanya, V.J. Surya, I. Lakshmi, K. Iyakutti, V. Vasu, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

8. Electronic and Magnetic Properties of Boron Nitride Nanoribbons with Square-Octagon (4 | 8) Line Defects..... 631
 Nanotechnology, **25**[11] (2014) pp.11570201-11570210
 Yang Han, Rui Li, Jian Zhou, Jinming Dong and Yoshiyuki Kawazoe

9. Simulation of Transmission Electron Microscope Images of Dislocations Pinned by Obstacles 641
 Mater. Trans., JIM, **55**[3] (2014) pp.413-417
 Yuhki Satoh, Takahiro Hatano, Nobuyasu Nita, Kimihiro Nogiwa and Hideki Matsui

10. Asymmetric Twins in Rhombohedral Boron Carbide 646
 Appl. Phys. Lett. , **104**[2] (2014) pp.02190701-02190704
 Takeshi Fujita, Pengfei Guan, K. Madhav Reddy, Akihiko Hirata, Junjie Guo and Mingwei Chen

11. Magnesium Ion Dynamics in Mg(BH₄)_{2(1-x)}X_{2x} (X = Cl or AlH₄) from First-Principles Molecular Dynamics Simulations..... 650
 RSC Adv., [3] (2014) pp.1366-1370
 Tamio Ikeshoji, Eiji Tsuchida, Shigeyuki Takagi, Motoaki Matsuo and Shin-ichi Orimo

12. Anomalous Nonadditive Dispersion Interactions in Systems of Three One-Dimensional Wires 655
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, **89** (2014) pp.04514001-04514009
 Alston J. Misquitta, Ryo Maezono, Neil D. Drummond, Anthony J. Stone and Richard J. Needs

13. Microscopic Mechanism of Plastic Deformation in A Polycrystalline Co–Cr–Mo Alloy With A Single hcp Phase..... 664
 Acta Mater., **64** (2014) pp.1-11
 Hiroaki Matsumoto, Yuichiro Koizumi, Tetsuya Ohashi, Byong-Soo Lee, Yunping Li and Akihiko Chiba

14. Asymmetric Slip Trace Formation in Tension/Compression Cyclic Deformation of Biomedical Co–Cr–Mo–N Alloy with Negative Stacking Fault Energy..... 675
 Scr. Mater., **74** (2014) pp.52-55
 Takuya Mitsunobu, Yuichiro Koizumi, Byoung-Soo Lee and Akihiko Chiba

15. Self-Accelerating CO Sorption in A Soft Nanoporous Crystal..... 679
 Science xpress, **343** (2014) pp.167-170
 Hiroshi Sato, Wataru Kosaka, Ryotaro Matsuda, Akihiro Hori, Yuh Hijikata, Rodion V. Belosludov, Shigeyoshi Sakaki, Masaki Takata and Susumu Kitagawa

16. A New Carbon Allotrope with Six-Fold Helical Chains In All-sp² Bonding Networks 687
 Sci. Rep., **4** (2014) pp.433901-433905
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Enge Wang and Yoshiyuki Kawazoe

17. Lithium-Doped Triazine-Based Graphitic C₃N₄ Sheet for Hydrogen Storage at Ambient Temperature 692
 Comput. Mater. Sci., **81** (2014) pp.275-279
 Guizhi Zhu, Kun Lü, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

III. 国際会議発表論文

<2013 年>

1. From Phase Equilibria to Mechanical Properties
-Application of Cluster Variation method-..... 697
The forty-second CALPHAD International Conference (CALPHAD XLII)
Hotel NH Aranzazu, San Sebastian, Spain(2013.5.26-2013.5.31) No.O15 (Oral)
Yasunori Yamada and Tetsuo Mohri
2. Role of Hydride in Fast Ion Conduction in Complex Hydride with BH_4 and AlH_4 :
First Principles Simulations..... 698
The 19th International Conference on Solid State Ionics
Kyoto International Conference Center, Ktoto, Japan(2013.6.2-2013.6.7) (Poster)
Tamio Ikeshoji, Eiji Tsuchida, Motoaki Matsuo and Shin-ichi Orimo
3. Cluster Variation Method and its Applications to Materials Science..... 699
International Workshop on Materials Design Process, Thermodynamics, Kinetics
and Microstructure Control (TKM2013)
IMDEA Materials Institute, Madrid, Spain(2013.6.3-2013.6.4)
Tetsuo Mohri
4. Magnetoelectric Effect in Topological Insulator Films Beyond Linear Response
Regime 700
Emergent Quantum Phases in Condensed Matter Symposium (EQPCM2013)
Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Chiba,
Japan(2013.6.12-2013.6.14) No.P05 (Poster)
Oleg A. Tretiakov, Dashdeleg Baasanjav and Kentaro Nomura
5. First-principles Calculations of Iron/Transition-metal Carbide Interfaces:
Local Stress and Local Energy Distribution..... 701
14th International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in
Materials(iib2013)
Athena Pallas Village, Halkidiki, Greece(2013.6.23-2013.6.28) (Oral)
Vikas Sharma, Shingo Tanaka, Yoshinori Shiihara and Masanori Kohyama

6. First-principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Materials Interfaces 702
 7th International Conference on Materials Structure and Micromechanics of Fracture (MSMF7)
 Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Brno, Czech(2013.7.1-2013.7.3) (Invited)
 Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, Somesh Kr. Bhattacharya, Vikas Sharma, Hao Wang and Yoshinori Shiihara
7. Multicomponent Molecular Orbital Study on Positron Attachment to Alkali-metal Hydride Molecules 703
 The XVII International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics and the XVIII International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms (POSMOL2013)
 Kanazawa Bunka Hall, Ishikawa, Japan(2013.7.19-2013.7.21) No.P-19 (Poster)
 Takayuki Oyamada and Masanori Tachikawa
8. Local Stress and Local Energy Distribution in Iron/Transition Metal Carbide Interfaces using First-principles Calculations 704
 International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4)
 Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, Japan(2013.7.22-2013.7.24) (Oral)
 Vikas Sharma, Shingo Tanaka, Yoshinori Shiihara and Masanori Kohyama
9. Overcome the Present Status of *ab initio* Simulation for Materials Design and ACCMS Activity 705
 The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-7)
 Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.IA-11 (Invited)
 Yoshiyuki Kawazoe

10. Theoretical Study on Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon
by Tersoff Potential..... 706
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.IB-07 (Invited)
Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
11. The Almighty First-principles Program, TOMBO 707
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.IB-10 (Invited)
Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Shota Ono, Yoshifumi Noguchi, Ryoji Sahara,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
12. The Algorithm for Calculating Van der Waals Dispersion Coefficients within The
All-electron Mixed-Basis Approach 708
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.IB-11 (Invited)
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, V. V. Larin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki
and Y. Kawazoe
13. Mechanical Properties of Dilute Si in Bcc-Fe: an Integrated Study Based on
Firstprinciples..... 709
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.OB-09 (Oral)
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Ken Suzuki, Hideo Miura
and Tetsuo Mohri

14. Simulation of Structural Transitions and Composition for Neon Hydrates
Based on Ice I_h and Ice II..... 710
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P1-37 (Poster)
Yu. Yu. Bozhko, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe,
V. R. Belosludov and V. M. Fomin
15. Catalytic Properties of Near-surface Alloy of Transition Metal in Aluminum:
A Density Functional Theory Study on Structural and Electronic Properties..... 711
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P1-42 (Poster)
G. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
16. Modulation of BN-C Hetero-nanotubes by External Electric Fields :
A Firstprinciples Study 712
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P1-44 (Poster)
Yunye Liang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
17. Investigation of Structure Factor and Collective Vibration Properties
Using the Lattice Dynamics Method 713
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-19 (Poster)
K. V. Gets, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki
and Y. Kawazoe
18. Hydrogen Storage in Argon Doped Clathrate Hydrates 714
The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science
(ACCMS-7)
Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-23 (Poster)
Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

19. Computational Simulation of Structure and Composition of Mine Gas Hydrates..... 715
 The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-7)
 Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-25 (Poster)
 T. P. Adamova, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov,
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe
20. Exploration on Ionic Liquid-H₂O Interaction using First Principles Study 716
 The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-7)
 Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-29 (Poster)
 V. J. Surya, Y. Kawazoe, H. Mizuseki, T. Nakamura, O. Subbotin, R. Belosludov
 and V. Belosludov
21. Theoretical Study of TiO₂ Nanoparticles Interaction with Anchoring Group of Organic Dyes in Dye-Sensitized Solar Cells..... 717
 The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-7)
 Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-39 (Poster)
 Thi Nguyen-Minh, Hung Pham-Quang, Nguyen-Nguyen Pham-Tran, Yoshiyoki Kawazoe, Hiroshi Mizuseki and Duc Nguyen-Manh
22. Development of Hydrogen Storage Materials using TOMBO 718
 The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-7)
 Nakhon Ratchasima, Thailand(2013.7.23-2013.7.28) No.P2-54 (Poster)
 Ryoji Sahara, Koichi Tsuchiya, Hiroshi Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter,
 Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
23. Preface : The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference 719
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Preface)
 Kaoru Ohno, Zong Zeng, Vladimir Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

24. Computational Materials Science by using the New Supercomputer in IMR
 - 27 Years with Prof. Kawazoe 720
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International
 Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Keynote)
 Hiroshi Mizuseki
25. Description of Thermodynamic Properties of Gas Hydrates using Interaction
 Potentials Evaluated from TOMBO Program 721
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International
 Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov
 and Y. Kawazoe
26. Kinetic Origin of Phase Transformation Pathways in Carbon, Silicon and
 Germanium 722
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International
 Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe
27. Numerical Simulation of ACRT with a Fourier Legendre Spectral Element
 Method 724
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International
 Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 Zhong Zeng, Huan Mei, Zhouhua Qiu, Hiroshi Mizuseki
 and Yoshiyuki Kawazoe

28. Van der Waals Interaction within Density-functional Theory in the All-electron Mixed-basis TOMBO Approach 725
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov, H. Mizuseki
 and Y. Kawazoe
29. Effect of a Nickel Dimer on the Dissociation Dynamics of a Hydrogen Molecule 726
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter, Kaoru Ohno
 and Yoshiyuki Kawazoe
30. Mechanomagneto Effects in Fe-Si System 728
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Invited)
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing and Tetsuo Mohri
31. Some Studies on Pristine and Functionalized Graphene using First Principles Calculations 730
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Oral)
 V. J. Surya

32. Introduction of Wannier Function into TOMBO..... 732
 The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference
 Katahira Seminar Room Espace, Tohoku University, Japan(2013.8.21-2013.8.22)
 (Oral)
 Y. Y. Liang and Y. Kawazoe
33. Atomic Structure of Strontium-doped Belite from First-principles Calculations 734
 38th Conference on Our World in Concrete and Structures
 Singapore(2013.8.21-2013.8.23) (Oral)
 R. Sakurada, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and A. K. Singh
34. First Principle Structural Simulation of Soft Magnetic FeSiB(PCu)
 Amorphous/Nano-Crystalline Alloy 742
 The 21st Soft Magnetic Materials Conference
 Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary(2013.9.1-2013.9.4) (Poster)
 Yaocen Wang, Masahiko Nishijima, Akihiro Makino and Yoshiyuki Kawazoe
35. Anion Reduction of Ionic-Liquid Molecules Coupled with Electron Transfer from
 Lithium Electrodes Studied by First-Principles Calculations..... 743
 64th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry
 Santiago de Querétaro, Mexico(2013.9.8-2013.9.13) (Oral)
 Yasunobu Ando, Yoshiumi Kawamura, Tamio Ikeshoji and Minoru Otani
36. Computational Model for Gas Storage in Clathrate Hydrate 744
 European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes 2013
 Barceló Renacimiento Hotel, Sevilla, Spain(2013.9.8-2013.9.13) No.O-MO-AM2-4
 (Oral)
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov
 and Y. Kawazoe

37. First-principles Study of Metal-organic Framework Materials for Selective Molecular Separation: The Role of Host-guest Interaction 745
 European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes 2013
 Barceló Renacimiento Hotel, Sevilla, Spain(2013.9.8-2013.9.13) No.O-TH-PM2-6
 (Oral)
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
38. Structural study of $\text{Fe}_{76}\text{Si}_9\text{B}_{10}\text{P}_5$ Amorphous Alloy by *Ab Initio* Simulation 746
 International Workshop on Amorphous and Nanostructured Magnetic Materials
 Tohoku University, Sendai, Japan(2013.10.1-2013.10.3) (Poster)
 Yaocen Wang, Akihiro Makino, Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
39. Theoretical Description of Hydrogen Hydrate Equilibrium in Wide Pressure-temperature Range 747
 The 3rd Russia - Japan workshop Problems of advanced materials
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk,
 Russia(2013.10.8-2013.10.10)
 R. K. Zhdanov, O. S. Subbotin and V. R. Belosludov
40. Magnetoelectric Effect in Topological Insulator Films Beyond Linear Response Regime 748
 International Workshop for Young Researchers on Topological Quantum Phenomena in Condensed Matter with Broken Symmetries 2013
 Culture Resort Festone , Okinawa, Japan(2013.10.22-2013.10.26) No.P-48 (Poster)
 O. A. Tretiako, D. Baasanjav and K. Nomura
41. Higher Level of *Ab Initio* Computer Simulation for Materials Design : How to Perform Theoretical Design of Materials 749
 International Symposium on Nanostructures and Their Applications in Renewable Energy (ISNARE-2013)
 Peking University, Beijing, China(2013.10.24-2013.10.27) (Invited)
 Yoshiyuki Kawazoe

42. Modeling on Adsorption Properties in Novel Hydrogen Storage Materials 750
 International Symposium on Nanostructures and Their Applications in Renewable Energy (ISNARE-2013)
 Peking University, Beijing, China(2013.10.24-2013.10.27) (Invited)
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe
43. How NiOOH Electrode in Ni-MH Battery Works: First Principles Molecular Dynamics Analysis 752
 224th ECS Meeting
 The Hilton San Francisco Hotel, San Francisco, CA, USA(2013.10.27-2013.11.1) (Oral)
 Tamio Ikeshoji, Minoru Otani, Tetsuya Morishita, Kunihiro Nobuhara, Shigeki Sato, Ikutaro Hamada and Shin-ichi Orimo
44. Study of Electronic and Ionic Structure of Glassy Fe₇₆Si₉B₁₀P₅ Alloy by *Ab Initio* Simulation 753
 the 58th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
 Denver, CO, USA(2013.11.4-2013.11.8) No.BR-15 (Poster)
 Yaocen Wang, Akihiro Makino, Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
45. Preface : The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization 754
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9) (preface)
 Yoshiyuki Kawazoe
46. Development of the All-electron Mixed Basis Program, TOMBO 755
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9) No.Key-2 (Keynote)
 Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Shota Ono, Hitoshi Adachi, Yoshifumi Noguchi, Marcel H. F. Sluiter, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe

47. Characterization of Zero-point Vibration in One-component Crystals..... 757
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Inv-2 (Invited)
Yong Yang and Yoshiyuki Kawazoe
48. Hydrogen Storage in Ni+MgH₂ and Ti+MgH₂ Clusters - A First Principles Study ... 758
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Inv-3 (Invited)
K. Iyakutti, R. Lavanya, V. Vasu, V.J. Surya and Y. Kawazoe
49. Role of Transition Metal in Catalyzing H₂ Splitting 759
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Inv-4 (Invited)
G. Chen and Y. Kawazoe
50. Electrochemical Characteristics of Halogen-doping Li₄Ti₅O₁₂ as Anode for
Lithium-ion Batteries..... 760
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Inv-6 (Invited)
Jeoung Eui Hong, Kwang Sun Ryu and Sang Uck Lee

51. Formalism for Calculation Van der Waals Dispersion Coefficients within the All-electron Mixed-basis Approach 761
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.Inv-7 (Invited)
 V. R. Belosludov O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
52. Modeling of Crystal Structures, Compositions and Structural Transitions in Neonwater System 762
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.Oral-2 (Oral)
 Yu. Yu. Bozhko, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, V. R. Belosludov and V.M. Fomin
53. Theoretical Modeling of the Phase Diagram of Hydrogen Clathrate Hydrate in Wide Pressure Range 763
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.Oral-3 (Oral)
 Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
54. First-principles Calculation for Stability Analysis of Fe-Ni System 764
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.Oral-8 (Oral)
 Tetsuo Mohri

55. Ion Transfer in Solid and Polymer Electrolyte..... 765
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Oral-10 (Oral)
Tamio Ikeshoji
56. Pressure Dependence on Phase Behavior of Polydisperse Lennard-Jones System.... 766
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Oral-17 (Oral)
Y. Terada, T. Keyes and J. Kim
57. All Carbon Mackay-like Crystals with 8-fold Symmetry 767
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.Oral-18 (Oral)
Y. Y. Liang, Makoto Tagami, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe
and Motoko Kotani
58. Electronic Structures and Formation Mechanism of Nd-O in Nd-Fe-B Magnets..... 768
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.PS-7 (Poster)
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimoto
59. Role of Electron-positron Correlation in Positron Attachment to LiH 769
The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
No.PS-8 (Poster)
Takayuki Oyamada and Masanori Tachikawa

60. DFT Study on Detection of Cysteine on Metalloporphyrins Coated ZnO nanostructures..... 770
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.PS-16 (Poster)
 V. J. Y. Surya, Y. Sivalingam, Y. Kawazoe, C. Di Natale and R. Paolesse
61. Half-Metallicity Modulation of Hybrid BN-C Nanotubes by External Electric Fields: A First-Principles Study 771
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.PS-23 (Poster)
 Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
62. Approximated MCMC of Heisenberg-model with Reduced usage of FFT 772
 The Eighth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (8thACCMS-VO)
 Tohoku University, Sendai and Taikanso, Matsushima, Japan(2013.11.7-2013.11.9)
 No.PS-29 (Poster)
 K. Shida and Y. Kawazoe
63. Exploration on Ionic Liquid-H₂O Interaction using First Principles Study 773
 The International Workshop on Recycling Technology of Critical Elements (IMRAM)
 Tohoku University, Sendai, Japan(2013.11.12)
 Yoshiyuki, Raman Surya, Rodion Belosludov, Oleg Subbotin and Vladimir Belosludov
64. Theoretical Investigations of the Structure-Properties Relationships of Porous Framework Materials for Designing Novel Materials..... 779
 The Workshop “ Metal Organic Frameworks in VNU-HCM”
 Center For Molecular and Nano Architecture Vietnam National University, Ho Chi Minh City, Vietnam(2013.11.13)
 Pham Tran Nguyen Nguyen

65. Engineering of Band Gap in Metal–Organic Frameworks by Functionalizing Organic Linker: A Systematic Density Functional Theory Investigation 780
 The 4th International Workshop on Nanotechnology and Application (IWNA) 2013
 Vung Tau, Vietnam(2013.11.14-2013.11.16)
 Hung Q. Pham, Toan Mai, Nguyen-Nguyen Pham-Tran, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Mizuseki and Duc Nguyen-Manh
66. Development of Hydrogen Storage Materials Using All Electron Mixed Basis Program TOMBO 781
 The Seventh International Conference on Materials Engineering for Resources (ICMR2013)
 Akita View Hotel, Akita, Japan(2013.11.20-2013.11.22) No.A1-1 (Keynote)
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
67. Effect of Size Polydispersity on Phase Equilibria of Lennard-Jones Systems..... 783
 2013 MRS Fall Meeting
 Hynes Convention Center & Sheraton Hotel, Boston, MA, USA(2013.12.1-2013.12.6) No.A8.10 (Oral)
 Yayoi Terada, Thomas Keyes and Jaegil Kim
68. Theoretical Study of Nano-Porous Materials for Gas Storage and Separation..... 784
 2013 MRS Fall Meeting
 Hynes Convention Center & Sheraton Hotel, Boston, MA, USA(2013.12.1-2013.12.6) No.OO4.07 (Oral)
 Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
69. First-principles Theory of Structural Transitions and Domain Structure in Bulk and Nano-scale Ferroelectrics..... 785
 International Union of Materials Research Society International Conference in Asia 2013 IUMRS-ICA
 National Science Seminar Complex, Bangalore, India(2013.12.16-2013.12.20) No.12-Inv-02 (Invited)
 Summayya Kouser, Jaita Paul, Anil Kumar, Takeshi Nishimatsu, Y Kawazoe, Karin M Rabe and Umesh V Waghmare

70. TOMBO, an All-electron Mixed Basis Program..... 787
 International Union of Materials Research Society International Conference in Asia
 2013 IUMRS-ICA
 National Science Seminar Complex, Bangalore, India(2013.12.16-2013.12.20)
 No.24-Inv-03 (Invited)
 Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Shota Ono, Hitoshi Adachi,
 Yoshifumi Noguchi, Marcel H. F. Sluiter, Ryoji Sahara
 and Yoshiyuki Kawazoe
71. All Carbon Mackay-Like Crystals with 8-fold Symmetry 788
 International Union of Materials Research Society International Conference in Asia
 2013 IUMRS-ICA
 National Science Seminar Complex, Bangalore, India(2013.12.16-2013.12.20)
 No.24-Inv-08 (Invited)
 Y. Y. Liang, Makoto Tagami, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe
 and Motoko Kotani

<2014年>

1. Electric-field-induced Modification in Magnetocrystalline Anisotropy, Exchange
 Interaction, and Curie Temperature of Transition-metal Thin Films 789
 2014 APS march meeting
 Colorado Convention Center, Denver, CO, USA(2014.3.3-2014.3.7) No.G7.00013
 (Oral)
 K. Nakamura, M. Oba, T. Akiyama, T. Ito, M. Weinert and A. J. Freeman
2. Magnetoelectric Effect in Topological Insulator Films Beyond Linear Response
 Regime 790
 2014 APS march meeting
 Colorado Convention Center, Denver, CO, USA(2014.3.3-2014.3.7) No.Y41.00005
 (Oral)
 Oleg Tretiakov, Dashdeleg Baasanjav and Kentaro Nomura

3. Theoretical Study of Gas Storage Materials Based on Clathrate Hydrates..... 791
13th International Conference on the Physics and Chemistry of Ice (PCI-2014)
Thayer School of Engineering Dartmouth College, Hanover, NH,
USA(2014.3.17-2014.3.20) (Oral)
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
and V. R. Belosludov

4. Thermodynamic Properties of Clathrate Hydrates as Gas Storage and
Separation Media: Theoretical Aspects..... 792
Gordon Research Conference: Natural Gas Hydrate Systems
Hotel Galvez, Galveston, TX, USA(2014.3.23-2014.3.28)
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov
and Y. Kawazoe

5. Theoretical Prediction of Epitaxial Growth of Rubrene Nanowires..... 794
7th Accelrys Focused User Group Meeting
Sang Uck Lee

IV. 予稿集

<2013 年>

1. 鉄中の硼素 – 第一原理計算による理解…………… 795
合金状態図 第 172 委員会 第 25 回委員会・研究会
東京工業大学(2013.4.22)
沼倉 宏, ソイシ マオウイア, 陳 迎

2. アルカリ金属水素化分子への陽電子束縛機構における
電子-陽電子相関の役割…………… 804
第 16 回理論化学討論会
福岡市健康づくりサポートセンター, 福岡(2013.5.15-17) No.2P25 (Poster)
小山田 隆行, 立川 仁典

3. Theoretical Study of Nanoporous Materials to Gas Storage Applications…………… 805
第 125 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2013 年春季)
東北大学金属材料研究所(2013.5.22-23) (Invited)
Rodion Belosludov

4. 半導体中キャリアの 3 次元分布計算と EL イメージへの応用…………… 806
第 125 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2013 年春季)
東北大学金属材料研究所(2013.5.22-23) (Poster)
沓掛 健太郎, 宮崎 直人, 鮫島 崇, 立花 福久, 小椋 厚志, 大野 裕,
徳本 有紀, 宇佐美 徳隆, 米永 一郎

5. スーパーコンピューティングシステムにおけるリアルタイムグラフ
作成システムの機能拡張…………… 807
第 125 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2013 年春季)
東北大学金属材料研究所(2013.5.22-23) (Poster)
五十嵐 伸昭, 一関 京子, 大滝 大河, 藤川 源一, 八鍬 友一, 勝倉 真,
村山 英, 松本 秀一

6. Approach of Structural Simulation on Fe-based Metallic Glass with DFT…………… 808
第 125 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2013 年春季)
東北大学金属材料研究所(2013.5.22-23) (Poster)
Y. Wang, M. Nishijima, A. Makino and Y. Kawazoe

7. 溶質原子間相互作用の実験と理論…………… 809
日本鉄鋼協会 第3回鉄鋼科学セミナー
東京八重洲ホール, 東京(2013.6.3) (Oral)
沼倉 宏
8. *Ab initio* Simulation of FeSiB(PCu) Amorphous Alloy …………… 819
ナノ学会第11回大会
東京工業大学 百年記念館(2013.6.6-8) No.O-14 (Oral)
Yaocen Wang, Masahiko Nishijima, Akihiro Makino and Yoshiyuki Kawazoe
9. Modeling of Composition and Formation Conditions of Binary Hydrates with
Methane and Carbon Dioxide…………… 820
ナノ学会第11回大会
東京工業大学 百年記念館(2013.6.6-8) No.O-16 (Oral)
O. Subbotin, R. Belosludov, H. Mizuseki, V. Belosludov, Y. Kawazoe
and T. Nakamura
10. Theoretical Study of Nanoporous Materials with Weak Guest-Host Interactions …… 821
ナノ学会第11回大会
東京工業大学 百年記念館(2013.6.6-8) No.P1-42 (Poster)
R.V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
and Y. Kawazoe
11. Nature of Water Solubility Difference in Ionic Liquids …………… 822
ナノ学会第11回大会
東京工業大学 百年記念館(2013.6.6-8) No.P1-47 (Poster)
O. Subbotin, R. Belosludov, H. Mizusek, V. Belosludov, Y. Kawazoe
and T. Nakamura
12. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料設計…………… 823
ナノ学会第11回大会
東京工業大学 百年記念館(2013.6.6-8) No.P2-41 (Poster)
佐原 亮二, 土谷 浩一, 水関 博志, Marcel Sluiter, 大野 かおる, 川添 良幸

13. GdCo_2B_2 と $\text{GdCo}_2\text{B}_2\text{C}$ の相関係およびこれらの性質 824
 公益社団法人日本セラミックス協会 第26回秋季シンポジウム
 信州大学 長野キャンパス(2013.9.4-6) No.1PQ03 (Poster)
 宍戸 統悦, 湯蓋 邦夫, 森 孝雄, 田中 雅彦, 岡田 繁, 野村 明子,
 菅原 孝昌, 佐原 亮二, 林 好一, 古曳 重美, 澤田 豊, 手嶋 勝弥,
 大石 修治, 川添 良幸, 吉川 彰
14. 電子構造に基づく相安定性、相平衡及び物理特性の第一原理モデリング 825
 日本金属学会 秋期講演大会(2013)
 金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.S3・2 (Keynote)
 陳 迎, Arkapol Saengdeejing, 毛利 哲夫, 岩田 修一
15. Local Mechanical Properties of Iron-Precipitate Coherent Interfaces Using
 First-Principles Calculations 826
 日本金属学会 秋期講演大会(2013)
 金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.S2・11 (Oral)
 Vikas Sharma, 香山 正憲, 田中 真悟, 椎原 良典
16. 新規 Li-Fe 系錯体水素化物の探索 827
 日本金属学会 秋期講演大会(2013)
 金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.S5・4 (Oral)
 高木 成幸, 池庄司 民夫, 佐藤 豊人, 青木 勝敏, 折茂 慎一
17. $\text{LiCa}(\text{AlH}_4)_3$ の脱水素化反応における結晶構造の変化 828
 日本金属学会 秋期講演大会(2013)
 金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.S5・11 (Oral)
 佐藤 豊人, 高木 成幸, 折茂 慎一
18. 侵入型水素化物 $\text{Al}_2\text{CuH}_x(x \sim 1)$ の結晶構造 829
 日本金属学会 秋期講演大会(2013)
 金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.S5・20 (Oral)
 齋藤 寛之, 高木 成幸, 遠藤 成輝, 町田 晃彦, 青木 勝敏, 折茂 慎一,
 片山 芳則

19. Cluster Variation Method および Nudged Elastic Band 法による
B2 規則相中の $1/2[111]$ らせん転位のパイエルスポテンシャルの計算…………… 830
日本金属学会 秋期講演大会(2013)
金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.293 (Oral)
山田 泰徳, 三浦 誠司, 毛利 哲夫
20. 錯イオン BH_4^- , AlH_4^- を含む電解質中の陽イオン伝導における水素原子の役割
- 第一原理分子動力学シミュレーション -…………… 831
日本金属学会 秋期講演大会(2013)
金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.511 (Oral)
池庄司 民夫, 土田 英二, 高木 成幸, 松尾 元彰, 折茂 慎一
21. $\text{LiCa}(\text{AlH}_4)_3$ の格子振動特性、結晶構造、脱水素化反応の解明…………… 832
日本金属学会 秋期講演大会(2013)
金沢大学 角間キャンパス(2013.9.17-19) No.P22 (Poster)
赤城 拓馬, 佐藤 豊人, 高木 成幸, 折茂 慎一
22. 多成分系分子軌道法による極性分子 LiH への陽電子束縛機構の研究 …… 833
第7回分子科学討論会
京都府民総合交流プラザ, 京都(2013.9.24-27) No.2P124 (Poster)
小山田 隆行, 立川 仁典
23. 点集合置換法による長周期カノニカルセルタイリングの作製Ⅱ…………… 835
日本物理学会 2013 年秋季大会
徳島大学常三島キャンパス(2013.9.25-28) No.25pDE-2 (Oral)
藤田 伸尚
24. サファイア単結晶ギャップ型パルスコイルの特性評価…………… 836
日本物理学会 2013 年秋季大会
徳島大学常三島キャンパス(2013.9.25-28) No.26aKD-3 (Oral)
長尾 智将, 鳴海 康雄, 野尻 浩之, 大山 研司, 森岡 貴之, M. L. Baker,
吉居 俊輔, 金道 浩一

25. 多分散レナードジョーンズシステムのガラス転移近傍の
多分散度・圧力・温度依存性 837
日本物理学会 2013 年秋季大会
徳島大学常三島キャンパス(2013.9.25-28) No.26aKP-3 (Oral)
寺田弥生, T. Keyes, J. Kim
26. フェロセンの酸化還元に伴う水の構造変化と対イオンの影響:
赤外分光解析 838
2013 年電気化学秋季大会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2013.9.27-28) No.1H02 (Oral)
内田 太郎, 池庄司 民夫, 大澤 雅俊
27. フェロセンと水ならびに対イオンとの相互作用:
第一原理分子動力学計算 839
2013 年電気化学秋季大会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2013.9.27-28) No.1H03 (Oral)
池庄司 民夫, 内田 太郎, 大澤 雅俊
28. Nd-Fe-B 磁石の粒界相 Nd-O 電子構造計算 840
合金状態図 第 172 委員会 第 26 回委員会・研究会
仙台(2013.10.4-5) (Keynote)
陳 迎, アカポール シンヂジン
29. Formation Mechanism of fcc-NdO_x at Nd-Fe-B Grain Boundary Phase 847
The 10th ESICMM seminar
物質・材料研究機構 コラボレート・リサーチビル(2013.11.28) (Invited)
Ying Chen
30. 電気化学系の第一原理分子動力学計算 848
第 59 回ポーラログラフイーおよび電気分析化学討論会
石垣市民会館, 沖縄(2013.11.28-1) (Invited)
池庄司 民夫

31. Theoretical Study of Properties of Some Industrial Materials 849
 Special Seminar of Hoffmann- Ashcroft
 Cornell University, NY, USA(2013.12.6) (Invited)
 Ying Chen
32. RCo_2B_2 と $\text{RCo}_2\text{B}_2\text{C}$ (R=Gd,Y)の相関係と性質 850
 第8回日本フラックス成長研究発表会
 芝浦工業 大学豊洲キャンパス(2013.12.6) No.1P24 (Poster)
 宍戸 統悦, 湯蓋 邦夫, 森 孝雄, 田中 雅彦, 岡田 繁, 野村 明子,
 菅原 孝昌, 戸澤 慎一郎, 小原 和夫, 鎌本 喜代美, 佐原 亮二, 林 好一,
 古曳 重美, 澤田 豊, 手嶋 勝弥, 大石 修治, 川添 良幸, 吉川 彰
33. 多分散レナード・ジョーンズ系における相図の粒度分布と温度依存性 852
 第4回 CMSI 研究会
 東京大学 柏キャンパス(2013.12.10-13) No.F-3 (Oral)
 寺田弥生, T. Keyes, J. Kim
34. 偏極中性子散乱装置 POLANO の概要と建設計画 853
 Japanese Society for Neutron Science 2013(JSNS13)
 さわやかちば県民プラザ, 柏, 千葉(2013.12.12-13) No.PS-76 (Poster)
 大山 研司, 横尾 哲也, 伊藤 晋一, 大河原 学, 金子 直勝, 鈴木 純一,
 岩佐 和晃, 佐藤 卓, 猪野 隆, 田崎 誠司, 竹谷 薫, 石元 茂, 武田 全康,
 奥 隆之, 吉良 弘, 林 好一, 平賀 晴弘, 藤田 全基, 富安 啓輔, 木村 宏之,
 J. G. Park
35. 偏極中性子散乱装置 POLANO のビーム輸送シミュレーション 854
 Japanese Society for Neutron Science 2013(JSNS13)
 さわやかちば県民プラザ, 柏, 千葉(2013.12.12-13) No.PS-77 (Poster)
 大山 研司, 南部 光江, 横尾 哲也, 岩佐 和晃, 伊藤 晋一, 佐藤 卓,
 大河原 学
36. First-principles study of some rare-earth oxides 855
 Workshop on recent progress in rare-earth using ab initio approaches
 Uppsala University, Uppsala, Sweden(2013.12.20-21) (Invited)
 Ying Chen

<2014年>

1. LiH エピタキシャル薄膜の成長機構 856
第 61 回応用物理学会春季学術講演会
青山学院大学 相模原キャンパス(2014.3.17-20) No.20p-D6-3 (Oral)
大口 裕之, 池庄司 民夫, 桑野 博喜, 白木 将, 折茂 慎一, 一杉 太郎

2. イオン液体中の Li^+ イオンと O_2^- イオンの振る舞いの理論的解明
-リチウム空気電池を念頭において- 857
第 61 回応用物理学会春期学術講演会
青山学院大学 相模原キャンパス(2014.3.17-20) No.19p-PA3 (Poster)
鄭 善鎬, フィリッポ フェデリッチ, 赤木 和人

3. 偏極中性子散乱装置 POLANO での偏極デバイス評価 858
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所サイエンスフェスタサイ
エンスフェスタ 2013
つくば国際会議場, 筑波, 茨城(2014.3.18-19) No.247U (Poster)
大山 研司, 横尾 哲也, 伊藤 晋一, 岩佐 和晃, 大河原 学, 南部 光江,
猪野 隆, 田崎 誠司, 奥 隆之, 吉良 弘, 武田 全康, 竹谷 薫, 石元 茂

4. 固溶 C, N と合金元素の相互作用:最近の進展 859
日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-23) (Symposium)
沼倉 宏

5. α 鉄中の炭素原子と 3d 遷移金属元素の原子間相互作用 863
日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-23) No.194 (Oral)
平松 靖也, 沼倉 宏, 宮本 吾郎, 古原 忠

6. α 鉄中の C-(Al, Si), N-(Al, Si) の原子間相互作用 864
日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会
東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-23) No.195 (Oral)
渡辺 裕介, Souissi Maaouia, 沼倉 宏

7. α 鉄中の炭素-リン、窒素-リンの原子間相互作用 865
 日本鉄鋼協会第 167 回春季講演大会
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-23) No.PS-62 (Poster)
 赤田 愛, 沼倉 宏
8. Investigation of Precipitate/Iron Interfaces using First-Principles Local Energy and Local Stress 866
 日本金属学会 春期講演大会(2014)
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.S3・10 (Oral)
 Vikas Sharma, 香山正憲, 田中真悟, 椎原良典
9. Nd-Fe-B 磁石粒界相 Nd-O の形成機構の第一原理モデリング 867
 日本金属学会 春期講演大会(2014)
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.S7.3 (Oral)
 陳 迎, Arkapol Saengdeejing, 松浦 昌志, 杉本 論
10. Site Preference and Migration Energy of B, C, N, and O in α Iron: First-principles Calculations with Corrections for Elastic Interaction 868
 日本金属学会 春期講演大会(2014)
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.204 (Oral)
 Souissi Maaouia, Chen Ying, Numakura Hiroshi
11. XAS, RIXS を用いた Mg_2FeH_6 の電子状態観察 869
 日本金属学会 春期講演大会(2014)
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.382 (Oral)
 栗田 圭輔, 原山 勲, 千東 謙太, 関場 大一郎, 原田 慈久, 丹羽 秀治,
 木内 久雄, 尾嶋 正治, 高木 成幸, 松尾 元彰, 青木 勝敏, 折茂 慎一
12. 新規鉄錯体水素化物 Li_4FeH_6 の高温高压合成 870
 日本金属学会 春期講演大会(2014)
 東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.393 (Oral)
 齋藤 寛之, 高木 成幸, 松尾 元彰, 飯島 祐樹, 遠藤 成輝, 青木 勝敏,
 折茂 慎一

13. 8 族元素 Ru を含む錯体水素化物における Ru-H 結合及び脱水素化反応 …… 871
日本金属学会 春期講演大会(2014)
東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.394 (Oral)
佐藤 豊人, 高木 成幸, 松尾 元彰, Stefano Deledda, Björn C. Hauback,
折茂 慎一
14. 7 配位の錯イオンを含む錯体水素化物 M_3TH_7 ($M=Li, Na; T=Ru, Fe$)における
T-H 結合の形成機構 …… 872
日本金属学会 春期講演大会(2014)
東京工業大学 大岡山キャンパス(2014.3.21-24) No.395 (Oral)
高木 成幸, 池庄司 民夫, 松尾 元彰, 佐藤 豊人, 齋藤 寛之, 青木 勝敏,
折茂 慎一
15. 多分散粒子系における相図 …… 873
日本物理学会 第 69 回年次大会
東海大学 湘南キャンパス(2014.3.27-30) No.27aAA-7 (Oral)
寺田 弥生, T. Keyes, Kim
16. 第一原理シミュレーションによる Pt(322)ステップ表面での
水バイレイヤー中の OH 吸着及び水の解離 …… 874
日本物理学会 第 69 回年次大会
東海大学 湘南キャンパス(2014.3.27-30) No.27aAQ-1 (Oral)
木崎 栄年, 稲垣 耕司, 濱田 幾太郎, 森川 良忠
17. 外部電場下における遷移金属薄膜スピンスパイラル構造の第一原理計算 …… 875
日本物理学会 第 69 回年次大会
東海大学 湘南キャンパス(2014.3.27-30) No.27aPS-36 (Poster)
大場幹斗, 中村浩次, 秋山亨, 伊藤智徳
18. 白金|水界面における Pt-O(H)振動の電位制御第一原理計算 …… 876
電気化学会第 81 回大会
関西大学 千里山キャンパス(2014.3.29-31) No.1D31 (Oral)
Qian Yumi, 池庄司 民夫, 大谷 実行

V. 雑誌等掲載解説記事

<2013 年>

1. Calculation of Van der Waals Dispersion Coefficients with All-Electron Mixed-Basis Method 877
IMR KINKEN Research Highlights 2013 (2013) pp.23-24
Yoshiyuki Kawazoe
2. First-principles Study on Mechanical Properties of Fe-Si Alloy 879
IMR KINKEN Research Highlights 20123(2013) pp.65-66
Tetsuo Mohri

VI. 書籍

<2013 年>

1. Computational Materials Science and Computer-aided Materials Design and Processing 881
Handbook of Sustainable Engineering (2013) pp. 1215 -1247
Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe, Oleg S. Subbotin, Ravil K. Zhdanov and Vladimir R. Belosludov

VII. 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 915
2. 東北大学金属材料研究所構内図..... 916
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図 917