

2014 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

(2014 年 4 月～2015 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. 第一原理計算によるビーライト/水界面における水分子吸着機構の理論解析……1
秋田工業高等専門学校 桜田良治
東北大学 金属材料研究所 Rodion Belosludov
日本大学 生産工学部 鷗澤正美
太平洋セメント(株) 中央研究所 細川佳史
東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添良幸
Indian Institute of Science Abhishek Kumar Singh
2. 磁気構造シミュレーションによる永久磁石の保磁力モデルの構築……………3
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 塚原宙、小野寛太
3. 鉄合金およびジルコニウム合金の照射損傷過程……………6
東北大学金属材料研究所 佐藤裕樹、阿部弘亨、松川義孝、松永哲也、
叶野翔、木下詩織、趙子寿、國井大地、五月女貴平

4. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による金属クラスター上での分子の
解離シミュレーション.....8
- 物質・材料研究機構 佐原亮二
 東北大学 池庄司民夫
 名古屋大学 尾上順
 滋賀県立大学 奥 健夫、鈴木 厚志
 早稲田大学 小笠原 義仁
 山梨大学 小林 潔、堀 裕和、根城 均
 東京工業大 増田 秀樹
5. マルチスケールシミュレーションによる構造材料における
マルテンサイト変態の機構解明.....9
- 物質・材料研究機構 佐原亮二、Wenchong Zhou
 名城大学 土屋文
 筑波大学 Wenchong Zhou
6. スピルオーバーを利用した水素貯蔵材料の高密度化..... 12
- 物質・材料研究機構 佐原亮二
7. 3d 遷移金属薄膜における巨大垂直磁気異方性及び電界誘起磁性に関する
第一原理計算..... 13
- 三重大学大学院工学研究科 中村浩次
8. 全電子混合基底第一原理プログラム TOMBO の開発と応用..... 17
- 横浜国立大学 大学院工学研究院 大野かおる、小野頌太、
 Swastibrata Bhattacharya
 横浜国立大学 大学院工学府 桑原理一、野田祐輔
 ダッソーシステムズ・バイオビア(株) 桑原理一
 日本学術振興会(DC2) 野田祐輔
 物質・材料研究機構 佐原亮二
 東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添良幸
 東北大学 金属材料研究所 Rodion Belosludov

9. 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 19
 横浜国立大学 大学院工学研究院 大野かおる、小野頌太、
 Swastibrata Bhattacharrya
 横浜国立大学 大学院工学府 桑原理一、野田祐輔
 ダッソーシステムズ・バイオビア(株) 桑原理一
 日本学術振興会(DC2) 野田祐輔
 物質・材料研究機構 佐原亮二
 東北大学 未来科学技術共同研究センター 川添 良幸、志田 和人
10. 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
 — クラスレート半導体の熱電特性 — 23
 山口大学 赤井光治、仙田康浩、嶋村修二
11. 固体電気化学系の第一原理シミュレーション 25
 東北大学 金属材料研究所 松尾元彰、池庄司民夫
12. First-principles Study of Ni Doping Effect on Mechanical Properties of Dilute Fe-Si alloy 28
 Institute of Engineering Education, School of Engineering, Tohoku University
 Ying Chen
 FRRRI and Department of Nanomechanics, School of Engineering,
 Tohoku University Ying Chen, Arkapol Saengdeejing
 CCMS IMR, Tohoku University Tetsuo Mohri
13. Phase Stability of Dy-Nd and Dy-Fe Binary Systems and Cu-doped Nd-O for Nd-Fe-B Magnets 31
 FRRRI and Department of Nanomechanics, School of Engineering,
 Tohoku University Arkapol Saengdeejing, Ying Chen
 Department of Materials Science, Graduate School of Engineering
 Tohoku University Masashi Matsuura, Satoshi Sugimoto
14. 原子結合のひずみに起因したカーボンナノチューブ電子物性変動要因の解明・36
 東北大学工学研究科ナノメカニクス専攻 大西正人

15. Magnetolectric Response in Silicene Doped with Transition Metal Elements Doping ... 39
 Department of Physics, Tsinghua University, China, Rui Zheng, Jun Ni
 FRRRI and Department of Nanomechanics, School of Engineering
 Tohoku University Rui Zheng, Ying Chen
16. 水素化物の計算材料科学 40
 東北大学 金属材料研究所 高木成幸、佐藤豊人、李関喬、松尾元彰、
 折茂慎一
 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 池庄司民夫、宇根本篤、
 折茂慎一
17. 鉄における侵入型溶質原子と置換型溶質原子の相互作用とナノクラスタ形成 · 43
 大阪府立大学工学研究科 JST-CREST 沼倉宏、Souissi Maaouia
18. 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 47
 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
19. 電子論によって評価した熱力学物性値の状態図計算への応用 50
 東北大学 多元物質科学研究所 大谷博司
20. Convex Hull の温度・圧力依存性からみた Heusler 型 Fe 基合金の相安定性 52
 東北大学 多元物質科学研究所 榎木勝徳、大谷博司
21. 正二十面体準結晶におけるクラスタ充填の最適化アルゴリズム 54
 東北大学 多元物質科学研究所 藤田伸尚
22. 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 · 58
 東北大学・金属材料研究所 沓掛健太郎、杉岡翔太、出浦桃子、大野裕、
 米永一郎
23. 流体力学計算方法高度化による新規 PET 用シンチレータ創成を目指した
 結晶成長シミュレーション 60
 東北大学 未来科学技術共同研究センター 横田有為

24. Self-assembly of Metal Atoms on Graphene	62
College of Engineering, Peking University Jian Zhou, Qian Wang NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
25. Penta-graphene: A New Carbon Allotrope	64
College of Engineering, Peking University Qian Wang, Jian Zhou NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
26. Stability and Properties of 2D Porous Nanosheets Based on Tetraoxa[8]circulene Analogues	66
Department of Materials Science and Engineering, College of Engineering, Peking University Qiang Sun NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
27. Phase-field-based Finite Volume Method for Simulating Thermocapillary Flows	68
Department of Engineering Mechanics, Chongqing University Zhong Zeng, Long Qiao, Haiqiong Xie IMR, Tohoku University Akira Yoshikawa NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
28. 球体微粒子の自己組織化シミュレーション	71
東北大学 工学研究科 材料工学システム専攻 菊池圭子	
29. 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	74
東北大学金属材料研究所 大山研司、南部光江	
30. 分極した点欠陥による強誘電体の相転移の制御の分子動力学 シミュレーション	79
東北大学 金属材料研究所 西松毅 デュースブルク-エッセン大 Anna Grünebohm	
31. Electrocaloric Response of KNbO ₃ from a First-principles Effective Hamiltonian	81
Department of Materials Science and Engineering, Iowa State University Scott P. Beckman, Jordan A. Barr	

32. Accurate Description of Thermodynamic Properties of Clathrate Hydrates with Complex Guest Compositions for Solving Urgent Environmental Issues 84
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS R. K. Zhdanov,
 Y. Y. Bozhko, K. V. Gets, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
 Korea Institute of Science and Technology H. Mizuseki
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
33. Electronic Band Structures of LiCaAlF_6 and LiSrAlF_6 as Laser Host Media for the Development of Energy-saving Solid-state Ultraviolet Laser 88
 Institute of Natural and Mathematical Sciences, Massey University
 Marilou Cadatal-Raduban
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 Institute of Laser Engineering, Osaka University Marilou Cadatal-Raduban ,
 Luong Viet Mui, Kohei Yamanoi, Toshihiko Shimizu, Nobuhiko Sarukura
 Institute of Academic Initiatives, Osaka University
 Marilou Cadatal-Raduban
34. The Calculation Viscosity of Ionic Liquid Using Molecular Dynamic Simulation Method 92
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS R. K. Zhdanov,
 V. R. Belosludov
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 NICHe, Tohoku University Surya V.J. Yuvaraj, V. R. Belosludov,
 Y. Kawazoe
35. Thermodynamic Properties of Clathrate Hydrates Based on Ice Frameworks 95
 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
 NICHe, Tohoku University O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, Y. Kawazoe
 Korea Institute of Science and Technology, Seoul, Korea H. Mizuseki

36. Theoretical Study Of Boson Peak In Low Density Amorphous Ice Using Lattice Dynamics Method..... 98
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS K.V. Gets,
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
37. 超低損失磁心材料技術の基盤要素に関する大規模シミュレーション研究 101
 東北大学 金属材料研究所 西嶋雅彦、汪姚岑、竹内章、牧野彰宏
 東北大学 未来科学技術共同開発センター 志田和人、川添良幸
38. *Ab initio* Simulation on Fe-rich Soft Magnetic Amorphous Alloys 104
 IMR, Tohoku University Yaocen Wang, Akira Takeuchi,
 Masahiko Nishijima, Akihiro Makino
 NICHe, Tohoku University Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe
 Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS Yoshiyuki Kawazoe
39. 超低損失磁心材料の低損失性発現機構の微視的な解明 108
 東北大学未来科学技術共同研究センター 志田和人 川添良幸
40. フラストレート磁性体の計算科学的研究 109
 兵庫県立大学・物質理学研究科 中野博生
41. 原子力関連材料の計算科学的研究 112
 東北大学・金属材料研究所 小無健司、八登唯夫
42. HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明 116
 株式会社日産アーク 茂木昌都、大脇創、今井英人
43. 紫外・真空紫外透明ガラス材料の開発 121
 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター・清水俊彦、猿倉信彦、
 山ノ井航平、瀬戸慧大、ムイ ヴィエト・ロン

44. 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……………122
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
45. 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……………123
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
46. 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…125
名古屋工業大学大学院 尾形修司、河野貴久、鍛島康裕、田中宏一
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
47. 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……………127
産業技術総合研究所 電池技術研究部門 Vikas Sharma、田中真悟、
香山正憲
48. 液体シリコンプロセスに対する計算科学的研究……………133
北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 本郷研太、前園涼

49. 合金相平衡の理論計算	138
東北大学 金属材料研究所 毛利 哲夫、山田亮、山田泰徳、珍田祥宏、 寺田弥生	
大阪大学 譯田真人	
北見工業大学 大橋鉄也	
東北大学 金属材料研究所	
WIGNER Research Centre for Physics Laszlo Granasy	
Inst. of Physics, Slovak Academy of Sciences Ivan Stich, Derian Rene, Brndiar Jan	
Cornell University Roald Hoffmann, Huayun Geng	
50. 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	145
産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 宮本良之	
51. エネルギー変換の界面科学	149
大阪大学 大学院工学研究科 木崎栄年、金森仁美、稲垣耕司、原口誠、 森川良忠	
52. Fe-Co-Cr 可鍛性磁石鋼におけるスピノーダル分解の フェーズフィールド計算	154
東北大学 金属材料研究所 小泉雄一郎、祝迫ひとみ、千葉晶彦	
53. Polymorphic Phase Transition Mechanism of Compressed Coesite	157
School of Physics, Astronomy and Computational Science, George Mason University Q.Y. Hu, H.W. Sheng	
WPI Advanced IMR, Tohoku University T. Fujita	
54. Computational Study of the Binary MGs with Different Beta-relaxation Behaviors ...	160
Beijing Computational Science Research Center Pengfei Guan	
55. Doping and interface induced electronic conductivity in Li ₂ O ₂ : A first principles study	161
WPI Advanced IMR, Tohoku University L.J. Kang, C. Li, X.D. Xu, T. Fujita, M.W. Chen	

56. リチウム空気電池におけるリチウム酸化物の生成・分解についての
理論研究 166
東北大学 AIMR 赤木和人
57. Theretical Study on Solvation Structure of Lithium Ion and Superoxide Anion in
EMI-TFSI and Dimethyl Sulfoxide 168
Advanced IMR, Tohoku University Sunho Jung, Kazuto Akagi
58. 全電子混合基底法第一原理計算プログラム開発と移動体用材料設計
シミュレーション 173
東北大学医工学研究科 松木英敏
59. 全電子混合基底第一原理計算の開発
コンピュータシミュレーションによる自動車用プログラム及び材料開発 175
(株)豊田自動織機 研究開発センター 安田修一、井上博登、田中 寿光、
藤敬司
東北大学未来科学技術共同研究センター 川添良幸
60. CH₂分子の等電子異核系列のフント則の解釈 176
仙台高等専門学校 丸山洋平
61. Theoretical Modeling of Materials for Energy Conversion 178
L.N. Gumilyov Eurasian National University Talgat M. Inerbaev
62. Theoretical Investigation of Metal-Organic Frameworks (MOFs), Covalent Organic
Frameworks (COFs) and Organic Dyes for DSC 183
Faculty of Chemistry, University of Science, Vietnam National University
Nguyen-Nguyen Pham-Tran . Hung Q. Pham, Thi Nguyen ,Khung M. Trang
NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
Korea Institute of Science and Technology Hiroshi Mizuseki
Theory and Modeling Department, Culham Centre for Fusion Energy, United
Kingdom Atomic Energy Authority Duc Nguyen-Manh

63. Development of Mixed-basis *Ab-initio* Calculation Program with Dynamical Electron Behavior and its Application to Nanostructured Materials 189
 NICHe, Tohoku University Yunye Liang, Yoshiyuki Kawazoe
64. Investigating the C₆₀-M-graphene Models Using Density-Functional-Theory Calculations 194
 Faculty of Materials Science, University of Science,
 Vietnam National University Hung M. Le
65. Degenerate Perturbation in Band-Gap Opening of Graphene Superlattice 198
 Department of Physics, University of Jinan G. Chen
 NICHe, Tohoku University Y. Y. Liang, Y. Kawazoe
66. Origin of Pressure Induced Electrical Conductance Change of Carbon Nanotubes 203
 Department of Applied Chemistry, Hanyang University Sang Uck Lee
67. 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO の電子伝導とファンデルワールス力計算機能開発とナノ構造材料設計への適用 212
 東北大学 工学研究科電子工学専攻 金井浩
68. フッ化水素分子への陽電子束縛における分子振動と電子-陽電子相関の役割 ... 215
 横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究科 小山田隆行
69. Structural and Electronic Properties of Oxygen-deficient Ta₂O₅ 219
 Institute of Solid State Physics, Chinese Academy of Sciences Yong Yang
 The Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo Osamu Sugino
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
70. Native Point Defects in Few-layer Phosphorene 221
 Department of Applied Physics, Xi'an University of Technology V. Wang
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
 Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS Y. Kawazoe
 School of Materials Science and Engineering, University of Science and
 Technology Beijing W. T. Geng

71. Phase Stability and Transition of BaSi₂-type Disilicides and Digermanides224
 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences Jian-Tao Wang
 Department of Physics, University of Nevada Changfeng Chen
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
72. Electrically Tunable In-Plane Anisotropic Magnetoresistance in Topological
 Insulator BiSbTeSe₂ Nanodevices225
 National University of Singapore Shen Lei
73. Survey of Bimolecular Complexes following a Yellow Brick Road
 (Potential Energy Curves for Moieties in Face-to-Face Orientation using *Ab initio* Post
 Hartree-Fock Computational Chemistry Methodology)227
 IMR, Tohoku University Michael R Philpott
 Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, Chemistry Department,
 University of California Berkeley Michael R Philpott
74. Topological Properties Determined by Atomic Buckling in Self-Assembled
 Ultrathin Bi(110)233
 School of Materials Science and Engineering, Zhejiang University
 Yunhao Lu
 Department of Physics, National University of Singapore Yunhao Lu,
 Lei Shen, Yuan Ping Feng
75. Computational Design of Nanostructured New Materials using Density Functional
 Theory235
 Department of Physics and Nanotechnology, SRM University K. Iyakutti
 SRM Research Institute, SRM University E. Mathan Kumar, S. Sinthika,
 Ranjit Thapa
 NICHe, Tohoku University V.J. Surya, Y. Kawazoe
76. MXenes: Two-Dimensional Transition Metal Carbides and Nitrides with Novel
 Electronic Properties240
 National Institute for Materials Science Mohammad Khazaei, Masao Arai,
 Taizo Sasaki
 NICHe, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
 Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS Yoshiyuki Kawazoe

77. Modulation in Properties of Layered MoSe₂ on Ni(111) Substrate.....242
 Department of Materials Science, Indian Association for the Cultivation of
 Science A.H.M. Abdul Wasey, S. Chakrabarty, G. P. Das
 NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
78. 合金に於ける相分離機構解明に関する大規模シミュレーション研究246
 東北大学 金属材料研究所 今野豊彦
79. Can Twins Enhance The Elastic Stiffness of Face-centered-cubic Metals?247
 B. Wen, R. Melnik, Y. Kawazoe, J.L. Du, J.W. Xiao, H.C. Dong, Y. Cheng,
 Y.W. Li, X. Feng
80. 希少元素高効率化抽出技術の基盤要素に関する
 大規模シミュレーション研究252
 東北大学 多元物質科学研究所 中村崇
81. The Analytical Expressions for Elements of The Kohn- Sham Equations within
 The All-Electron Mixed-Basis Approach for Cluster at Large Unit Cell254
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS V. R. Belosludov,
 O. S. Subbotin
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 NICHe, Tohoku University V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, Y. Kawazoe
82. From Gas Phase to Bulk Phase of Complex Systems: A First Principles Study259
 NICHe, Tohoku University V. J. Surya, Y. Kawazoe
 IMRAM, Tohoku University V. J. Surya, O. Subbotin, R. Zhdanov,
 V. R. Belosludov
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS O. Subbotin,
 R. Zhdanov, V. R. Belosludov
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov
 Institute of Thermophysics, SB RAS Y. Kawazoe

83. Molecular Level Simulation of The Mixed Ozone Containing Clathrate Hydrates Formation in Stratosphere.264
Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS O. S. Subbotin,
V. R. Belosludov
IMR, Tohoku University O. S. Subbotin,
V. R. Belosludov, R. V. Belosludov
NICHe, Tohoku University Y. Kawazoe
84. Extraction of Neodymium from Aqueous Phase to Preselected Ionic Liquids – Insights from Quantum Chemical Calculations267
IMRAM, Tohoku University Mariusz Grabda, Sylwia Oleszek,
Dmytro Kozak, Mrutyunjay Panigrahi, Etsuro Shibata, Takashi Nakamura
Institute of Environmental Engineering of the Polish Academy of Sciences
Mariusz Grabda, Sylwia Oleszek
85. 液体から固体への相変化に関する計算機実験 II270
東北大学 金属材料研究所 HPCI 戦略プログラム計算材料科学研究拠点
寺田弥生、Sankar DebNath
東北大学 金属材料研究所 毛利 哲夫"

II. 原著論文

<2014 年>

1. Degenerate Perturbation in Band-Gap Opening of Graphene Superlattice273
J. Phys. Chem. C, 118[15] (2014) pp.8174-8180
S. L. Xiu, L. Gong, V. Wang, Y. Y. Liang, G. Chen and Y. Kawazoe
2. First Principles Studies on Hydrogen Storage in Single-walled Carbon Nanotube
Functionalized with TiO₂280
Solid State Commun., 183 (2014) pp.1-7
M. Kanmani, R. Lavanya, D. Silambarasan, K. Iyakutti, V. Vasu
and Y. Kawazoe
3. Negatively Curved Cubic Carbon Crystals with Octahedral Symmetry287
Carbon, 76 (2014) pp.266-274
Makoto Tagami, Yunye Liang, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe
and Motoko Kotani
4. Phase Stability Limit of c-BN Under Hydrostatic and Non-hydrostatic Pressure
Conditions296
J. Chem. Phys., 140[16] (2014) pp.1647041-1647047
Jianwei Xiao, Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe
and Xiangyi Zhang
5. Improved Interaction of Hydrogen on Transition-Metal-Doped Al(100)
Stepped Surface303
J. Phys. Chem. C, 118[14] (2014) pp.7442-7450
M. M. Zheng, Q. Ren, G. Chen and Y. Kawazoe
6. Structural and Magnetic Study of Fe₇₆Si₉B₁₀P₅ Metallic Glass by First Principle
Simulation312
IEEE Trans. Magn., 50[4] (2014) pp.20037041-20037044
Yaocen Wang, Yan Zhang, Akihiro Makino, Yunye Liang
and Yoshiyuki Kawazoe

7. Can Twins Enhance the Elastic Stiffness of Face-centered-cubic Metals? 316
 Comput. Mater. Sci., 89 (2014) pp.24-29
 Dejiu Shen, Jinglian Du, Roderick Melnik and Bin Wen

8. Thermal Equation of State of Solid Naphthalene to 13 GPa and 773 K: *In situ* X-ray
 Diffraction Study and First Principles Calculations 322
 J. Chem. Phys., 140[16] (2014) pp.1645081-1645088
 Anna Y. Likhacheva, Sergey V. Rashchenko, Artem D. Chanyshv, Talgat M. Inerbaev, Konstantin D. Litasov and Dmitry S. Kilin

9. An Effective Method of Tuning Conducting Properties: First-principles Studies on
 Electronic Structures of Graphene Nanomeshes 330
 Carbon, 79 (2014) pp.646-653
 S. L. Xiu, M. M. Zheng, P. Zhao, Y. Zhang, H. Y. Liu, S. J. Li, G. Chen and Y. Kawazoe

10. First-principles Studies on Structural, Mechanical, Thermodynamic and Electronic
 Properties of Ni-Zr Intermetallic Compounds 338
 Intermetallics, 54 (2014) pp.110-119
 Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik and Yoshiyuki Kawazoe

11. Exceptionally Long-ranged Lattice Relaxation in Oxygen-deficient Ta₂O₅ 348
 Solid State Commun., 195 (2014) pp.16-20
 Yong Yang, Osamu Sugino and Yoshiyuki Kawazoe

12. Nanostructures of C₆₀-Metal-Graphene (Metal = Ti, Cr, Mn, Fe, or Ni):
 A Spin-Polarized Density Functional Theory Study 353
 J. Phys. Chem. C, 118[36] (2014) pp.21057-21065
 Hung M. Le, Hajime Hirao, Yoshiyuki Kawazoe and Duc Nguyen-Manh

13. Determining Characteristic Principal Clusters in the “cluster-plus-glue-atom”
 Model 362
 Acta Mater., 75 (2014) pp.113-121
 Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik and Yoshiyuki Kawazoe

14. Single Adatom Dynamics at Monatomic Steps of Free-standing Few-layer Reduced Graphene 371
 Sci. Rep., 4 (2014) pp.60371-60376
 Haixin Chang, Mitsuhiro Saito, Takuro Nagai, Yunye Liang,
 Yoshiyuki Kawazoe, Zhongchang Wang, Hongkai Wu, Koji Kimoto
 and Yuichi Ikuhara
15. Cooperatively Enhanced Catalytic Properties of Ti@Al(100) Near-surface Alloy for Aluminum Hydrogenation 377
 Int. J. Hydrogen Energy, 39[23] (2014) pp.11963-11975
 M. M. Zheng, S. L. Xiu, P. Zhao, Y. Zhang, H. Y. Liu, S. J. Li, T. Q. Ren,
 G. Chen and Y. Kawazoe
16. Self-healing Monovacancy in Low-buckled Silicene Studied by First-principles Calculations 390
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, 90[4] (2014) pp.454251-454255
 Rui Li, Yang Han, Ting Hu, Jinming Dong and Y. Kawazoe
17. Half-metallicity Modulation of Hybrid BN-C Nanotubes by External Electric Fields: A First-principles Study 395
 J. Chem. Phys., 140[23] (2014) pp.23470201-23470211
 Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
18. Nano-crystallization and Magnetic Mechanisms of Fe₈₅Si₂B₈P₄Cu₁ Amorphous Alloy by *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation 406
 J. Appl. Phys., 115[17] (2014) pp.1739101-1739105
 Yaocen Wang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino, Yunye Liang
 and Yoshiyuki Kawazoe
19. Theoretical Study of Hydrogen Storage in Binary Hydrogen-methane Clathrate Hydrates 411
 J. Renewable Sustainable Energy, 6[5] (2014) pp.5313201-5313220
 R. V. Belosludov, R. K. Zhdanov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki Y. Kawazoe
 and V. R. Belosludov

20. Electronic Properties of Silicene Superlattices: Roles of Degenerate Perturbation and Inversion Symmetry Breaking 431
 J. Mater. Chem. C, 2[41] (2014) pp.8773-8779
 L. Gong, S. L. Xiu, M. M. Zheng, P. Zhao, Z. Zhang, Y. Y. Liang, G. Chen and Y. Kawazoe
21. Phase Transformation of Cadmium Sulfide Under High Temperature and High Pressure Conditions 438
 PCCP, 16[28] (2014) pp.14899-14904
 Jianwei Xiao, Bin Wen, Roderick Melnik, Yoshiyuki Kawazoe and Xiangyi Zhang
22. Electronic and Magnetic Properties of Armchair MoS₂ Nanoribbons Under Both External Strain and Electric Field, Studied by First Principles Calculations 444
 J. Appl. Phys., 116[6] (2014) pp.643011-643018
 Ting Hu, Jian Zhou, Jinming Dong and Yoshiyuki Kawazoe
23. Tuning Electronic and Magnetic Properties of Silicene with Magnetic Superhalogens 452
 PCCP, 16[42] (2014) pp.22979-22986
 Tianshan Zhao, Shunhong Zhang, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
24. Theoretical Evaluation on Solubility of Synthesized Task Specific Ionic Liquids in Water 460
 J. Mol. Liq., 200[B] (2014) pp.232-237
 Surya V. J. Yuvaraj, Oleg S. Subbotin, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. Stability and Properties of 2D Porous Nanosheets Based on Tetraoxa[8]circulene Analogues 466
 Nanoscale, 6[24] (2014) pp.14962-14970
 Jiabing Yu, Qiang Sun, Y. Kawazoe and Puru Jena

26. An Alternative Lattice Boltzmann Model for Three-dimensional Incompressible Flow.....475
 Comput. Math. Appl., 68[10] (2014) pp.1107-1122
 Liangqi Zhang, Zhong Zeng, Haiqiong Xie, Xutang Tao, Yongxiang Zhang, Yiyu Lu, Akira Yoshikawa and Yoshiyuki Kawazoe
27. A Comparative Study of Lattice Boltzmann Models for Incompressible Flow 491
 Comput. Math. Appl., 68[10] (2014) pp.1446-1466
 Liangqi Zhang, Zhong Zeng, Haiqiong Xie, Yongxiang Zhang, Yiyu Lu, Akira Yoshikawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
28. Magnetoelectric Effect in Topological Insulator Films Beyond the Linear Response Regime 512
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, 90[4] (2014) pp.451491-451496
 Dashdeleg Baasanjav, O. A. Tretiakov, and Kentaro Nomura
29. An Ideal Polymeric C₆₀ Coating on a Si Electrode for Durable Li-ion Batteries 518
 Carbon, 77 (2014) pp.1140-1147
 Minwoong Joe, Young-Kyu Han, Kwang-Ryeol Lee, Hiroshi Mizuseki and Seungchul Kim
30. Theoretical and Experimental Investigation of the Excellent p–n Control in Yttrium Aluminoborides 526
 Sci. Technol. Adv. Mater., 15[3] (2014) pp.350121-350128
 Ryoji Sahara, Takao Mori, Satofumi Maruyama, Yuzuru Miyazaki, Kei Hayashi and Tsuyoshi Kajitani
31. First-principles Study of Electronic Structures and Stability of Body-centered Cubic Ti–Mo Alloys by Special Quasirandom Structures 534
 Sci. Technol. Adv. Mater., 15[3] (2014) pp.350141-350149
 Ryoji Sahara, Satoshi Emura, Seiichiro Ii, Shigenori Ueda and Koichi Tsuchiya
32. Radiation-induced Glide Motion of Interstitial Clusters in Concentrated Alloys..... 543
 Philos. Mag., 94[19] (2014) pp.2170-2187
 Y. Satoh, H. Abe and T. Matsunaga

33. Stable Spin States of Boron, Aluminum and Silicon Dimers in a Self-consistent *GW* Calculation 561
 Mod. Phys. Lett. B, 28[20] (2014) pp.14501661-14501669
 Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
34. Epitaxial Thin Film Growth of LiH using a Liquid-Li Atomic Template..... 570
 Appl. Phys. Lett., 105[21] (2014) pp.2116011-2116015
 Hiroyuki Oguchi, Tamio Ikeshoji, Takeo Ohsawa, Susumu Shiraki,
 Hiroki Kuwano, Shin-ichi Orimo and Taro Hitosugi
35. Vibrational Dynamics of Sulfate Anion Adsorption on Pt(111) Surface: *Ab Initio*
 Molecular Dynamics Simulations..... 575
 ChemElectroChem, 1[10] (2014) pp.1632-1635
 Yumin Qian, Tamio Ikeshoji, Yuan-yuan Zhao and Minoru Otani
36. Formation of the Face-Centered Cubic (FCC)-NdO_x Phase at Nd/Nd-Fe-B
 Interface: A First-Principles Modeling 579
 JOM, 66[7] (2014) pp.1133-1137
 Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimot
37. Enhanced Tunability of Thermodynamic Stability of Complex Hydrides by the
 Incorporation of H⁻ Anions 584
 Appl. Phys. Lett., 104[20] (2014) pp.2039011-2039014
 Shigeyuki Takagi, Terry D. Humphries, Kazutoshi Miwa and Shin-ichi Orimo
38. Li₄FeH₆: Iron-containing Complex Hydride with High Gravimetric Hydrogen
 Density 588
 APL Mater., 2[7] (2014) pp.761031-761037
 Hiroyuki Saitoh, Shigeyuki Takagi, Motoaki Matsuo, Yuki Iijima,
 Naruki Endo, Katsutoshi Aoki and Shin-ichi Orimo
39. Raman and Infrared Spectroscopic Studies on Li₄RuH₆ Combined with
 First-Principles Calculations..... 595
 Mater. Trans., JIM, 55[8] (2014) pp.1117-1121
 Toyoto Sato, Shigeyuki Takagi, Motoaki Matsuo, Katsutoshi Aoki,
 Stefano Deledda, Bjørn C. Hauback and Shin-ichi Orimo

40. Magnetization Process of the $S = 1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice 600
 J. Phys. Soc. Jpn., 83[5] (2014) pp.537021-537024
 Hiroki Nakano, Makoto Isoda and Tôru Sakai
41. Spin-Flop Phenomenon of Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets without Anisotropy in Spin Space 604
 J. Phys. Soc. Jpn., 83[8] (2014) pp.847091-847097
 Hiroki Nakano, Tôru Sakai and Yasumasa Hasegawa
42. Frustration-Induced Magnetic Properties of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice 611
 J. Phys. Soc. Jpn., 83[8] (2014) pp.847101-847107
 Makoto Isoda, Hiroki Nakano and Tôru Sakai
43. Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the $S = 1/2$ Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation 618
 J. Phys. Soc. Jpn., 83[10] (2014) pp.1047101-1047107
 Hiroki Nakano and Tôru Sakai
44. Fluctuating Local Recrystallization of Quasi-Liquid Layer of Sub-Micrometer-Scale Ice: A Molecular Dynamics Study 625
 J. Phys. Soc. Jpn., 83[8] (2014) pp.836011-836014
 Yasuhiro Kajima, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, Miyabi Hiyama and Tomoyuki Tamura
45. Anomalous Nonadditive Dispersion Interactions in Systems of Three One-dimensional Wires 629
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, 89[4] (2014) pp.451401-451409
 Alston J. Misquitta, Ryo Maezono, Neil D. Drummond, Anthony J. Stone and Richard J. Needs

46. Multi-component Molecular Orbital Study on Positron Attachment to Alkali-metal Hydride Molecules: Nature of Chemical Bonding and Dissociation Limits of [LiH; e⁺]638
 Eur. Phys. J. D, 68[8] (2014) pp.2311-2319
 Takayuki Oyamada and Masanori Tachikawa
47. Excited State Dynamics of Ru₁₀ Cluster Interfacing Anatase TiO₂(101) Surface and Liquid Water647
 J. Phys. Chem. Lett., 5[16] (2014) pp.2823-2829
 Shuping Huang, Talgat M. Inerbaev and Dmitri S. Kilin
48. Quantitative Evaluation of Phase Field Microstructure Based on the Variational Principle654
 Mater. Trans., JIM, 55[3] (2014) pp.489-492
 Kenji Iseya and Tetsuo Mohri
49. A Quantitative Evaluation of Phase Field Microstructure by the Spectral Analysis658
 Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 35[6] (2014) pp.788-793
 Kenji Iseya, Seiji Miura and Tetsuo Mohri
50. Mechanisms of Cr Segregation to C11b/C40 Lamellar Interface in (Mo,Nb)Si₂ Duplex Silicide: A Phase-field Study to Bridge Experimental and First-principles Investigations664
 Intermetallics, 54 (2014) pp.232-241
 Toshihiro Yamazaki, Yuichiro Koizumi, Koretaka Yuge, Akihiko Chiba, Koji Hagihara, Takayoshi Nakano, Kyosuke Kishida and Haruyuki Inui
51. Interface Migration with Segregation in MoSi₂-Based Lamellar Alloy Simulated by Phase-Field Method674
 Advanced Materials Research, 922 (2014) pp.832-837
 T. Yamazaki, Y. Koizumi, A. Chiba, K. Hagihara, T. Nakano, K. Yuge, K. Kishida and H. Inui

52. Thermodynamic Control of Diameter-Modulated Aluminosilicate Nanotubes681
 J. Phys. Chem. C, 118[15] (2014) pp.8148-8152
 Hoik Lee, Yangjun Jeon, Youngil Lee, Sang Uck Lee, Atsushi Takahara
 and Daewon Sohn
53. First-principles Studies on Structural, Mechanical, Thermodynamic and Electronic
 Properties of NiZr Intermetallic Compounds686
 Intermetallics, 54 (2014) pp.110-119
 Jinglian Du, Bin Wen, Roderick Melnik and Yoshiyuki Kawazoe

<2015 年>

1. First-Principles Study on Structural Stability of Belite696
 ACI Mater. J., 112[1] (2015) pp.85-94
 Ryoji Sakurada, Yoshiyuki Kawazoe, and Abhishek Kumar Singh
2. Sources of *n*-type Conductivity in GaInO₃706
 J. Phys. D: Appl. Phys., 48[1] (2015) pp.151011-151017
 V Wang, W Xiao, L-J Kang, R-J Liu, H Mizuseki and Y Kawazoe
3. Phase Stability and Transition of BaSi₂-type Disilicides and Digermanides713
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, 91[5] (2015) pp.541071-541075
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen and Yoshiyuki Kawazoe
4. Native Point Defects in Few-layer Phosphorene.....718
 Phys. Rev. B: Condens. Matter, 91[4] (2015) pp.454331-454339
 V. Wang, Y. Kawazoe and W. T. Geng
5. Self-assembly of Metal Atoms (Na, K, Ca) on Graphene727
 Nanoscale, 7[6] (2015) pp.2352-2359
 Jian Zhou, Shunhong Zhang, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

6. Electrically Tunable in-plane Anisotropic Magnetoresistance in Topological Insulator BiSbTeSe₂ Nanodevices735
 Nano Lett., 15[3] (2015) pp.2061-2066
 Azat Sulaev, Minggang Zeng, Shun-Qing Shen, Soon Khuen Cho,
 Wei Guang Zhu, Yuan Ping Feng, Sergey V. Eremeev,
 Yoshiyuki Kawazoe, Lei Shen and Lan Wang

7. Tuning the Electronic and Magnetic Properties of Phosphorene by Vacancies and Adatoms741
 J. Phys. Chem. C, 119[12] (2015) pp.6530-6538
 Pooja Srivastava, K. P. S. S. Hembram, Hiroshi Mizuseki, Kwang-Ryeol Lee,
 Sang Soo Han and Seungchul Kim

8. Electric-Field-Induced Modification of the Magnon Energy, Exchange Interaction, and Curie Temperature of Transition-Metal Thin Films750
 Phys. Rev. Lett., 114[10] (2015) pp.1072021-1072025
 M. Oba, K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, M. Weinert and A. J. Freeman

9. Porphyrin-based Porous Sheet: Optoelectronic Properties and Hydrogen Storage755
 Int. J. Hydrogen Energy, 40[9] (2015) pp.3689-3696
 Guizhi Zhu, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

10. Instability of a Ferrimagnetic State of a Frustrated $S = 1/2$ Heisenberg Antiferromagnet in Two Dimensions763
 Jpn. J. Appl. Phys., 54[3] (2015) pp.303051-303054
 Hiroki Nakano and Toru Sakai

11. Diffusion Monte Carlo Study of *Para*-Diiodobenzene Polymorphism Revisited767
 J. Chem. Theory Comput., 11[3] (2015) pp.907-917
 Kenta Hongo, Mark A. Watson, Toshiaki Iitaka, Alán Aspuru-Guzik
 and Ryo Maezono

12. Aqueous Medium Induced Optical Transitions in Cerium Oxide Nanoparticles778
 PCCP, 17[9] (2015) pp.6217-6221
 Talgat M. Inerbaev, Ajay S. Karakoti, Satyanarayana V. N. T. Kuchibhatla,
 Amit Kumar, Artëm E. Masunovd and Sudipta Seal

13. Manipulation of Phosphorescence Efficiency of Cyclometalated Iridium Complexes
by Substituted *o*-Carboranes783
Chem. Eur. J., 21[5] (2015) pp.2052-2061
Young Hoon Lee, Jihyun Park, Song-Jin Jo, Miyoung Kim,
Junseong Lee, Sang Uck Lee and Min Hyung Lee
14. Topological Properties Determined by Atomic Buckling in Self-Assembled Ultrathin
Bi(110)793
Nano Lett., 15[1] (2015) pp.80-87
Yunhao Lu, Wentao Xu, Mingang Zeng, Guanggeng Yao, Lei Shen,
Ming Yang, Ziyu Luo, Feng Pan, Ke Wu, Tanmoy Das, Pimo He,
Jianzhong Jiang, Jens Martin, Yuan Ping Feng, Hsin Lin and Xue-sen Wang

III. 国際会議発表論文

<Proceeding>

1. Possibility of Hydrogen Storage in SWCNT/TiO₂/SnO₂ Hybrid System
– An *Ab-initio* Study 801
AIP Conference Proceedings , **1591** (2014) pp.285-287
The 58th DAE Solid State Physics Symposium 2013
R. Lavanya, V. J. Surya, K. Iyakutti, V. Vasu and Y. Kawazoe
2. Construction of Polarized Inelastic Neutron Spectrometer in J-PARC 804
J. Phys. Conf. Ser., 502[1] (2014) Art.No. 012046
1st Conference on Light and Particle Beams in Materials Science
T. Yokoo, K. Ohoyama, S. Itoh, J. Suzuki, M. Nanbu, N. Kaneko, K. Iwasa,
T. J. Sato, H. Kimura and M. Ohkawara
3. Concepts of Neutron Polarisation Analysis Devices for a New Neutron Chopper
Spectrometer, POLANO, in J-PARC 809
J. Phys. Conf. Ser., **502**[1] (2014) Art.No. 012046
1st Conference on Light and Particle Beams in Materials Science
K. Ohoyama, T. Yokoo, S. Itoh, T. Ino, M. Ohkawara, T. Oku, S. Tasaki,
K. Iwasa, T. J. Sato, S. Ishimoto, K. Taketani, H. Kira, Y. Sakaguch,
M. Nanbu, H. Hiraka, H. M. Shimizu, M. Takeda, M. Hino, K. Hayashi,
U. Fliges and P. Hautle
4. Electronic properties of heterostructures of Graphene with Boron, Nitrogen and Boron
Nitride – A first principles study 813
International Journal of ChemTech Research, **7**[2] (2015) pp.685-689
International Conference on Nanoscience and Nanotechnology-2015
K. Iyakutti, E. Mathan Kumar, Ranjit Thapa, V.J. Surya and Y. Kawazoe
5. Penta-graphene: A New Carbon Allotrope 818
PNAS, **112**[8] (2015) pp.2372-2377
Shunhong Zhang, Jian Zhou, Qian Wang, Xiaoshuang Chen,
Yoshiyuki Kawazoe, and Puru Jena

<2014 年>

1. *Ab Initio* Local Energy and Local Stress: Essence of the Method and Recent Applications to Surfaces, Defects, and Interfaces 824
The 4th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC4)
ACT CITY HAMAMATSU Congress Center, Shizuoka, Japan
(2014.5.8-10) No.84 (Invited)
Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma, Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara

2. Effects of Plasma Exposure on Tritium Behavior of Long Term Installed Samples on First Wall in Spherical Tokamak Quest 826
21st International Conference on Plasma Surface Interactions (21st PSI)
Ishikawa Ongakudo, Ishikawa, Japan(2014.5.26-30) No.P2-099 (Poster)
K. Tokunaga, M. Matsuyama, S. Abe, S. Nagata, B. Tsuchiya, M. Tokitani, K. Araki, T. Fujiwara, Y. Miyamoto, M. Hasegawa, K. Nakamura, K. Hanada and H. Zushi

3. Electronic Structures and Formation Mechanism of Nd-O in Nd-Fe-B Magnets 827
The forty-third CALPHAD International Conference (CALPHAD XLIII)
Central South University, Hunan, China(2014.6.1-6) No.O55 (Oral)
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Ken Suzuki, Hideo Miura, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimoto

4. Theoretical Study of Binary Clathrate Hydrates N_2+CO_2 828
International conference Minerals of the ocean-7 & Deep-sea minerals and mining-4
VNIIOkeangeologia, St. Petersburg, Russia(2014.6.2-5)
O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, T. P. Adamova, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

5. Theoretical Study of Thermodynamic Properties of Nitrogen Hydrates in
The Presence of Carbene Dioxide and Methane 830
International conference Minerals of the ocean-7 & Deep-sea minerals and
mining-4
VNIIOkeangeologia, St. Petersburg, Russia(2014.6.2-5)
T. P. Adamova, O. S. Subbotin and V. R. Belosludov

6. Hydrate Clathrates for CO₂ Storage: Theoretical Study 831
International conference Minerals of the ocean-7 & Deep-sea minerals and
mining-4
VNIIOkeangeologia, St. Petersburg, Russia(2014.6.2-5)
V.R. Belosludov and O. S. Subbotin

7. First-principles Study of Alloying Effect of Chromium in Magnetite 832
2014 ACCMS-WGM Asia Consortium on Computational Materials Science -
Working Group Meeting on
"Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage"
L.N. Gumilyov Eurasian national University, Astana, Kazakhstan(2014.6.5-7)
Ying Chen and Arkapol Saendeejing

8. Investigation on Interaction of Water Molecules with Ionic Liquids using Classical
Molecular Dynamics and Density Functional Theory 833
2014 ACCMS-WGM Asia Consortium on Computational Materials Science -
Working Group Meeting on
"Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage"
L.N. Gumilyov Eurasian national University, Astana, Kazakhstan(2014.6.5-7)
V. J. Y. Surya, R. Zhdanov, Y. Kawazoe, R. Belosludov, V. Belosludov,
O. Subbotin, T. Nakamura and H. Mizuseki

9. First Principles Investigation on Hydrogen Storage in Calix[4]arene Crystal 834
2014 ACCMS-WGM Asia Consortium on Computational Materials Science -
Working Group Meeting on
"Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage"
L.N. Gumilyov Eurasian national University, Astana, Kazakhstan(2014.6.5-7)
V. J. Y. Surya, Y. Kawazoe, R. Sato, M. Yamada and F. Hamada

10. Study of the Origin of Boson Peak835
 2014 ACCMS-WGM Asia Consortium on Computational Materials Science -
 Working Group Meeting on
 "Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage"
 L.N. Gumilyov Eurasina national University, Astana, Kazakhstan(2014.6.5-7)
 K. V. Gets, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki
 and Y. Kawazoe
11. Effect of Self-preservation of Hydrogen Hydrate 836
 2014 ACCMS-WGM Asia Consortium on Computational Materials Science -
 Working Group Meeting on
 "Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage"
 L.N. Gumilyov Eurasina national University, Astana, Kazakhstan(2014.6.5-7)
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, R. V. Belosludov,
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe
12. Investigation for Phases Stability of Alloys System through First-principles
 Calculations 837
 Seminar of Department of Materials Science
 University of Science and Technology Beijing, Beijing, China(2014.6.9)
 (Invited)
 A. Saengdeejing and Y. Chen
13. Solute-Solute Interaction in Iron — Thermodynamic and Kinetic Aspects 838
 10th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL-2014)
 Le Tapis Rouge, Paris, France(2014.6.23-27) No.VIP048 (Invited)
 Hiroshi Numakura
14. Modeling of the Hydrogen Hydrates Phase Diagram in Wide Pressure Range 839
 The 8th International Conference on Gas Hydrates (ICGH8)
 China National Convention Center, Beijing, China(2014.7.28-1) No.P1.055
 (Poster)
 Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov
 and Yoshiyuki Kawazoe

15. Computation Modelling of Thermodynamic Properties of Nanoporous Materials
Toward Gas Storage and Separation 840
XXVI IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2014)
Boston University, Boston, MA, USA.(2014.8.11-14) No.92 (Oral)
Rodion Belosludov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov
and Yoshiyuki Kawazoe
16. Crystal Structure of Beta-form Belite Doped by a Divalent Ion 841
39th Conference on Our World in Concrete and Structures
Goodwood Park Hotel, Singapore(2014.8.20-22) No.4A-1 (Oral)
R. Sakurada, Y. Kawazoe and A. K. Singh
17. OH Adsorptions and Water Dissociation in Water-bilayer on Pt(322) Stepped
Surface: *Ab-initio* Simulations 850
8th International Conference on Environmental Catalysis (ICEC2014)
The Grove Park Inn Resort and Spa, Asheville, NC, USA.(2014.8.24-27)
No.SCE-O-04 (Oral)
H. Kizaki, Kouji Inagaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
18. *Ab Initio* Local Energy and Local Stress Applied to Materials Interfaces 852
The 15th International Union of Materials Research Society International
Conference in Asia (IUMRS-ICA 2014)
Fukuoka University, Fukuoka, Japan(2014.8.24-30) No.D12-I25-004
(Invited)
Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma,
Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara
19. Atomistic Prediction of Solute Hardening and Softening in Fe-Si Alloys 853
The 15th International Union of Materials Research Society International
Conference in Asia (IUMRS-ICA 2014)
Fukuoka University, Fukuoka, Japan(2014.8.24-30) No.D12-I27-008
(Invited)
Masato Wakeda, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata

20. Structural and Magnetic Property of $\text{Fe}_{85}\text{Si}_2\text{B}_8\text{P}_4\text{Cu}_1$ Amorphous Alloy by First Principle Simulation Study 854
 The 15th International Union of Materials Research Society International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2014)
 Fukuoka University, Fukuoka, Japan(2014.8.24-30) No.C1-O27-008 (Oral)
 Yaocen Wang, Akihiro Makino, Yoshiyuki Kawazoe and Yunye Liang
21. Iron/precipitate Interfaces: First Principles Investigation Through Local Energy and Local Stress Distribution 855
 The 15th International Union of Materials Research Society International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2014)
 Fukuoka University, Fukuoka, Japan(2014.8.24-30) No.D12-O25-006 (Oral)
 Vikas Sharma, Shingo Tanaka, Yoshinori Shiihara and Masanori Kohyama
22. A First Principles Study of the Excellent p-n Control in Yttrium Aluminoborides 856
 The 18th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials (ISBB2014)
 Hawaii Prince Hotel Waikiki, HI, USA.(2014.8.31-5) No.O-13 (Oral)
 R. Sahara, T. Mori, S. Maruyama, Y. Miyazaki, K. Hayashi and T. Kajitani
23. First-principle Study of Small Nickel Cluster Structure and Hydrogen Dissociation on Nickel Dimer 857
 17th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC-XVII)
 Kyushu University, Fukuoka, Japan(2014.9.7-12) No.A83 (Poster)
 Pham Thi Nu and Ohno Kaoru
24. Development of Two-dimensional Tactile Sensor Using Carbon Nanotubes 858
 2014 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2014)
 Tsukuba International Congress Center, Ibaraki, Japan(2014.9.8-11) No.P-8-1 (Oral)
 Masato Ohnishi, Meng Yang, Takuya Nozaki, Ken Suzuki and Hideo Miura

25. Theoretical Aspects of Atomistic Level Description of Nanoporous Materials 860
 IVth International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-IV)
 Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk,
 Russia(2014.9.8-11) No.38 (Oral)
 Rodion V. Belosludov
26. Spatial Distribution of State Densities Dominating Strain Sensitivity of Carbon
 Nanotubes 861
 2014 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and
 Devices (SISPAD2014)
 Mielparque yokohama, Kanagawa, Japan(2014.9.9-11) No.P4 (Poster)
 Masato Ohnishi, Ken Suzuki and Hideo Miura
27. Thermodynamic of Nanoporous Materials: Atomistic Level Description of with
 Applications to Energy Storage 863
 International Conference "Science of the Future"
 Saint Petersburg State University, St. Petersburg, Russia(2014.9.17-20)
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, R. K. Zhdanov, Yu. Bozhko,
 V. R. Belosludov and Y. Kawazoe
28. Ices and Hydrates as Medium for Hydrogen Storage and Self-preservation Effect 867
 International Conference "Science of the Future"
 Saint Petersburg State University, St. Petersburg, Russia(2014.9.17-20)
 V. R. Belosludov, Y. Y. Bozhko, R. K. Zhdanov, O. S. Subbotin,
 R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
29. Solute-solute Interaction in α Iron 868
 The 17th International Conference on Internal Friction and Mechanical
 Spectroscopy (ICIFMS-17)
 Howard Johnson TCP Hefei, Hefei, China(2014.9.21-26) No.K-A4 (Plenary)
 Hiroshi Numakura

30. Atomic Interaction of Phosphorus with Carbon and Nitrogen in Iron869
 The 17th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy (ICIFMS-17)
 Howard Johnson TCP Hefei, Hefei, China(2014.9.21-26) No.P-7 (Poster)
 A. Akata, Y. Watanabe and H. Numakura
31. First-principles Modelling of FCC-NdO_x Phase Formation at Nd/Nd-Fe-B Interface870
 7th International Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (IWANSAN2014)
 Grand Halong Hotel, Ha Long City, Vietnam(2014.11.2-6) No.TCMS1-I2 (Invited)
 Ying Chen, A. Saengdeejing, K. Suzuki, H. Miura, M. Matsuura and S. Sugimoto
32. First Principles Study of Electronic Structures and Stability in Structural Materials ...871
 7th International Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (IWANSAN2014)
 Grand Halong Hotel, Ha Long City, Vietnam(2014.11.2-6) (Invited)
 Ryoji Sahara
33. Theoretical Investigation on the Behavior of Li⁺ and O₂⁻ in a Model Li-air Battery ...872
 The 7th International Symposium on Surface Science (ISSS-7)
 Kunibiki Messe (Shimane Prefectural Convention Center) , Shimane, Japan(2014.11.2-6) No.4pB1-3 (Oral)
 Sunho Jung, Filippo Federici and Kazuto Akagi
34. First-principles Simulations of an H₂O Dissociation and Hydroxyl Adsorption in Water-bilayer on Pt(322) Surface873
 The 7th International Symposium on Surface Science (ISSS-7)
 Kunibiki Messe (Shimane Prefectural Convention Center) , Shimane, Japan(2014.11.2-6) No.3PA-44 (Poster)
 H. Kizaki, I. Hamada and Y. Morikawa

35. Electronic Configurations and Magnetic Anisotropy in Organometallic
Metalloenes.874
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.CQ-09 (Poster)
K. Nawa, Y. Kitaoka, K. Nakamura, T. Akiyama and T. Ito
36. Surface-induced Magnetocrystalline Anisotropy of Antiferromagnetic Cr₂O₃(0001)
Films.875
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.CQ-11 (Poster)
K. Nakamura, T. Akiyama and T. Ito
37. Magnetic Anisotropy in Single Fe-phthalocyanine Molecule on MgO(001)
Substrate.....876
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.CQ-12 (Poster)
Y. Kitaoka, K. Nakamura, T. Akiyama and T. Ito
38. Curie Temperatures of Transition-metal Thin Films in External Electric Field.877
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.FS-07 (Poster)
M. Oba, K. Nakamura, T. Akiyama and T. Ito
39. Characteristics of Magnetic Exchange in Fe Rich Amorphous Alloy by AIMD
Simulation.....878
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.FT-01 (Poster)
Yaocen Wang, Akira Takeuchi, Akihiro Makino, Yunye Liang
and Yoshiyuki Kawazoe

40. Giant Perpendicular Magnetocrystalline Anisotropy of *3d* Transition-metal
Thin Films on MgO879
The 59th Annual Magnetism and Magnetic Materials Conference
Hilton Hawaiian Village Conference Center, Honolulu, HI, USA.(2014.11.3-7)
No.GU-05 (Poster)
K. Nakamura, T. Akiyama and T. Ito
41. Prediction of Solid Solution Strengthening and Softening of Fe-Si Alloy based on
Electronic and Atomistic Modelling 880
International Workshop on Multiscale Computational Materials Science &
CMRI 研究会
Tohoku University, Sendai, Japan(2014.11.10-11) (Oral)
Masato Wakeda and Shigenobu Ogata
42. Electronic Conductivity of Carbon Nanotubes Under Anisotropic Strain Field881
ASME 2014 International Mechanical Engineering Congress & Exposition
(IMECE2014)
Montreal, Canada(2014.11.14-20) No.IMECE2014-40699 (Poster)
Masato Ohnishi, Yang Meng, Ken Suzuki and Hideo Miura
43. First-Principles Molecular Dynamics of Water Dissociation and Adsorption of
Hydroxyl Groups in Water-bilayer on Pt(322) Stepped Surface 882
The 1st International Symposium on Interactive Materials Science (iSIMSC)
Hotel Hankyu Expo Park, Osaka, Japan(2014.11.16-19) No.OP1-2 (Oral)
Hidetoshi Kizaki, Ikutaro Hamada and Yoshitada Morikawa
44. Molecular Modeling on Behavior of Ions in Non-aqueous Lithium-Air Battery 883
The 55th Battery Symposium in Japan
Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan(2014.11.19-21)
No.1B28 (Oral)
Sunho Jung, Filippo Federici and Kazuto Akagi

45. Theoretical Study of Molecular Separation in Nanoporous Materials for Realization Sustainable Future 884
 2014 MRS Fall Meeting
 HYNES Convention Center and Sheraton Boston Hotel, Boston, MA,
 USA.(2014.11.30-5) No.FF4.03 (Oral)
 Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
46. *Ab Initio* Local-Energy and Local-Stress Calculations: Applications to Materials Interfaces 885
 2014 MRS Fall Meeting
 HYNES Convention Center and Sheraton Boston Hotel, Boston, MA,
 USA.(2014.11.30-5) No.NN10.10 (Oral)
 Masanori Kohyama, Somesh K. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma,
 Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara
47. Brownian Dynamics Simulation of Monolayer Colloids with Repulsive Interactions in Crystal Growth 887
 2014 MRS Fall Meeting
 HYNES Convention Center and Sheraton Boston Hotel, Boston, MA,
 USA.(2014.11.30-5) No.NN8.21 (Oral)
 Yayoi Terada
48. First-principles Study of Mechanical Properties of Dilute Si in Fe-Si Alloy with Ni Doping 888
 2014 MRS Fall Meeting
 HYNES Convention Center and Sheraton Boston Hotel, Boston, MA,
 USA.(2014.11.30-5) No.YY8.10 (Oral)
 Ying Chen, Arkapol Saendeejing and Tetsuo Mohri
49. First-principle Calculations of Positron-attached Polyatomic Molecules 889
 The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD2014)
 National University of Singapore, Singapore, Singapore(2014.12.1-3)
 No..P-35 (Poster)
 Y. Kita, T. Oyamada, and M. Tachikawa

50. Three-dimensional Three-connected Carbene with 3,4,6-Fold Helical Chains in All-sp² Bonding Networks 890
 The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
 Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
 (2014.12.20-22) No.Key-2 (Keynote)
 Jian-Tao Wang
51. Clathrate Hydrates as Medium for Hydrogen Storage and Self-preservation Phenomena 892
 The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
 Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
 (2014.12.20-22) No.Inv-1 (Invited)
 V. R. Belosludov, Yu.Yu. Bozhko, R.K. Zhdanov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov and Y. Kawazoe
52. Theoretical Study on Gas Separation in MOF Structures 893
 The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
 Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
 (2014.12.20-22) No.Oral-2 (Oral)
 Rodion Belosludov and Y. Kawazoe
53. Effect of Trace Impurity on the Crystal Structure of Beta-Form Belite 894
 The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
 Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
 (2014.12.20-22) No.Oral-22 (Oral)
 Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Yoshiyuki Kawazoe and Abhishek Kumar Singh

54. *Ab Initio* Local-Energy and Local-Stress Calculations in Materials·····895
The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.Oral-28 (Oral)
Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma,
Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara
55. First Principle Study of Interaction Between Solute Si and Screw Dislocation in
Fe-Si Alloy·····896
The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.Oral-32 (Oral)
Masato Wakeda and Shigenobu Ogata
56. First Principles Study of Electronic Structures and Stability in Structural Materials ···897
The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.Oral-33 (Oral)
Ryoji Sahara
57. Host-site Substitution Effects for Electronic Structure of K-Ba-Ga-Sn Clathrates ·····898
The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-12 (Poster)
K. Akai, K. Kishimoto, T. Koyanagi and S. Yamamoto

58. The Extraordinary Magnetoelectric Response in Silicene Doped with Fe and Cr Atoms899
- The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
- Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-16 (Poster)
- Rui Zheng, Xianqing Lin, Jun Ni, Arkapol Saengdeejing, Ying Chen and Hideo Miura
59. Design of BN-60 Nanostructures and BN Diamondoids900
- The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
- Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-18 (Poster)
- E. Mathan Kumar, S. Sinthika , K. Iyakutti , Ranjit Thapa ,V.J. Surya and Y. Kawazoe
60. Phase Stability of the Dy-Nd and Dy-Fe Binary System901
- The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
- Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-2 (Poster)
- Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Masashi Matsuura and Satoshi Sugimoto
61. The Role of Molecular Vibration and the Electron-positron Correlation in Positron Attachment to Weakly Polar FH Molecule902
- The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
- Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-21 (Poster)
- Takayuki Oyamada and Masanori Tachikawa

62. Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for the Methylene Molecule.....903
The Ninth General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials
Science - Virtual Organization (9thACCMS-VO)
Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa, Japan
(2014.12.20-22) No.PS-30 (Poster)
Yohei Maruyama and Yoshiyuki Kawazoe

<2015 年>

1. Theoretical Investigation of Electronic Structures and Phase stability in Structural
Materials904
The 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9)
National University of Singapore, Singapore, Singapore (2015.1.7-11)
No.C7-02 (Invited)
Ryoji Sahara
2. Local Energy and Local Stress in Density-Functional Theory Calculations of
Materials905
The 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9)
National University of Singapore, Singapore, Singapore (2015.1.7-11)
No.B9-19 (Oral)
Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma,
Shingo Tanaka and Yoshinori Shiihara
3. Theoretical Study on the Formation and Decomposition of Li Oxides in a Model
Li-Air Battery906
The AIMR International Symposium 2015 (AMIS2015)
Sendai International Center, Sendai, Japan(2015.2.17-19) No.P-14 (Poster)
Kazuto Akagi

4. Electric-field-induced Modification in Curie Temperature of Co Monolayer on Pt(111)907
2015 APS march meeting
Henry B. Gonzalez Convention Center, San Antonio, TX, USA. (2015.3.2-6)
No.A30.00013 (Oral)
Kohji Nakamura, Mikito Oba, Toru Akiyama and Tomonori Ito

5. First-principles Study of Degradation of Mechanical Property of Oxidation and Inhibition of Chromium Alloying in Magnetite908
TMS2015 144th Annual Meeting & Exhibition
Walt Disney World, Orlando, FL, USA. (2015.3.15-19)
Ying Chen, Arkapol Saendeejing, Ken Suzuki, and Hideo Miura

IV. 予稿集

<2014 年>

1. Synthesis and Characterizations of the ThCr_2Si_2 -type GdCo_2B_2 and $\text{GdCo}_2\text{B}_2\text{C}$ 909
ナノ学会第12回大会
京都大学 宇治キャンパス (2014.5.22-24) No.P1-01 (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、川添良幸、吉川彰
2. First Principles Study on Interaction of Water Molecules with Ionic Liquids910
ナノ学会第12回大会
京都大学 宇治キャンパス (2014.5.22-24) No.P2-14 (Poster)
V. J. Surya, Y. Kawazoe, T. Nakamura, O. Subbotin, R. Zhdanov,
R. Belosludov, V. Belosludov and H. Mizuseki
3. Phase Field 法と Dislocation Dynamics simulation のカップリング手法による
BCC 規則合金中の転位運動の解析911
第127回 東北大学金属材料研究所講演会 (2014 年春季)
東北大学 金属材料研究所 (2014.5.28) No.64 (Poster)
山田泰徳、毛利哲夫
4. 球形マイクロ粒子の三次元自己組織化シミュレーション912
粉体粉末冶金協会 平成26年度春季大会
東海大学 湘南キャンパス (2014.6.3-5) No.2-50A (Oral)
菊池圭子、高木健太、野村直之、川崎亮
5. カーボンナノチューブの電気伝導特性ひずみ依存性913
M&M2014 材料力学カンファレンス
福島大学 金谷川キャンパス (2014.7.18-21) No.OS0205 (Oral)
大西正人、楊猛、鈴木研、三浦英生
6. 正二十面体準結晶におけるクラスタ充填問題への幾何学的アプローチ915
日本応用数理学会 2014 年度年会 (JSIAM2014)
政策研究大学院大学 (2014.9.3-5)
No.数学協働プログラム：数理科学の物質・材料科学への応用(1)-2 (Oral)
藤田伸尚

7. 希ガス原子の Van Der Waals 相互作用の第一原理計算……………917
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.7pAT-5 (Oral)
正地徹、小野頌太、大野かおる
8. 正二十面体準結晶の高次近似結晶における クラスタの局所的配列自由度……………918
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.8aBE-1 (Oral)
藤田伸尚
9. 遷移金属薄膜のキュリー温度に対する外部電場効果……………919
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.8aBF-5 (Oral)
大場幹斗、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳
10. Cr₂O₃(0001)における表面誘起垂直磁気異方性……………920
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.8aBF-9 (Oral)
生田雅幸、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳
11. 分極した点欠陥による強誘電体の相転移の制御の
分子動力学シミュレーション……………921
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.8pAE-6 (Oral)
西松毅、Anna Grünebohm、Pentel Entel
12. 詳細釣り合い条件を満たす遺伝的アルゴリズムの古典スピン系 MC への応用 ……922
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.10aAY-10 (Oral)
志田和人
13. 希土類金属超薄膜の電子構造と磁性……………923
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.7pPSA-79 (Poster)
池浦雄志、名和憲嗣、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳

14. Accurate Electronic Band Structure of Transition Metal Oxide with Doping using *GW* Calculation: Nb-doped Rutile TiO₂924
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学 春日井キャンパス (2014.9.7-10) No.9pPSA-2 (Poster)
Ming Zhang, Shota Ono and Kaoru Ohno
15. LiH 薄膜の配向制御とイオン伝導測定925
第 75 回応用物理学会秋季学術講演会
北海道大学 札幌キャンパス (2014.9.17-20) No.18p-A11-8 (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
16. 多成分系第一原理計算による極性の弱いハロゲン化水素分子への陽電子束縛機構の研究926
第 8 回分子科学討論会
広島大学 東広島キャンパス (2014.9.21-24) No.4P102 (Poster)
小山田隆行、立川仁典
17. Gaussian CVM を応用した熱力学特性の解析928
日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.45 (Oral)
山田泰徳、毛利哲夫
18. クラスタ変分法を用いた Fe-Ni インバー合金の熱膨張係数の特異な温度挙動の一考察929
日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.46 (Oral)
山田亮、毛利哲夫、陳迎
19. マグネタイトの酸化とクロム合金化効果の第一原理計算930
日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.57 (Oral)
陳迎、Arkapol Saengdeejing、鈴木研、三浦英生

20. Cluster Difference in High and Low Fe Content Amorphous Alloys by AIMD Simulation931
 日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.289 (Oral)
 Yaocen Wang, Akihiro Makino, Yunye Liang and Yoshiyuki Kawazoe
21. Convex Hull の温度・圧力依存性からみた Heusler 型 Fe 基合金の相安定性.....932
 日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.304 (Oral)
 榎木勝徳、飯久保智、大谷博司
22. 第一原理計算による β チタン合金の電子状態解析と相安定性933
 日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.J17 (Oral)
 佐原亮二、江村聡、土谷浩一
23. Analyses of Interfaces between Iron and MX (M=Ti, Nb; X=C, N) using the First-Principles Local Stress and Local Energy Distribution934
 日本金属学会 秋期講演大会 (2014)
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.S5・8 (Oral)
 Vikas Sharma、香山正憲、田中真悟、椎原良典
24. Behavior of C and N in Vicinity of Cr in α Iron: First-principles Study935
 日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.289 (Oral)
 Maaouia Souissi, Ying Chen and Hiroshi Numakura
25. First-principles Calculations of Elastic Properties of Fe-C and Fe-N Martensites936
 日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会
 名古屋大学 東山キャンパス (2014.9.24-26) No.315 (Oral)
 Maaouia Souissi, Ying Chen and Hiroshi Numakura

26. タイプ 2 構造 Sn クラスレート半導体の電子構造と熱電特性の検討937
第十一回 日本熱電学会学術講演会 (TSJ2014)
独立行政法人物質・材料研究機構 千現地区管理棟(2014.9.29-30)
No.S14-2 (Oral)
赤井光治、岸本堅剛、小柳剛、山本節夫
27. Interaction of Water Molecules with Ionic Liquids: an Investigation using
Classical Molecular Dynamics and Density Functional Theory938
第 1 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 コクヨホール(2014.10.31) (Poster)
V. J. Y. Surya, R. Zhdanov, Y. Kawazoe, R. Belosludov, V. Belosludov,
O. Subbotin, T. Nakamura and H. Mizuseki
28. 電子正孔系に対する密度行列・対分布関数を用いた相関同定939
第 8 回物性科学領域横断研究会
国際高等研究所(2014.11.21-24) No.D-3 (Oral)
前園涼
29. 電子論に基づく Fe-Si 合金中のらせん転位と固溶 Si の相互作用の評価940
日本機械学会 第 27 回計算力学講演会 (CMD2014)
岩手大学 工学部(2014.11.22-24) No.2105 (Oral)
譯田真人、尾方成信
30. Fe-Ni 合金の熱膨張係数の特異な温度挙動に対する
第一原理クラスター変分法計算による解析942
第 128 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2014 年秋季)
東北大学 金属材料研究所(2014.11.27-28) No.61 (Poster)
山田 亮、毛利哲夫、陳迎
31. Cluster Variable Method を応用した振動の自由エネルギーの計算943
第 5 回 CMSI 研究会
東北大学 片平キャンパス (2014.12.8-10) No.P-35 (Poster)
山田泰徳、毛利哲夫

32. 移流集積法を用いたコロイド凝固過程の数値実験モデル……………944
第5回 CMSI 研究会
東北大学 片平キャンパス (2014.12.8-10) No.P-37 (Poster)
寺田弥生
33. Investigation of Electronic Properties of Hydrated Task Specific Ionic Liquids
using Density Functional Theory ……………945
第5回 CMSI 研究会
東北大学 片平キャンパス (2014.12.8-10) No.P-45 (Poster)
Surya V.J. Yuvaraj, Ravil Zhdanov, Rodion V. Belosludov,
Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki,
Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, Hiroshi Mizuseki
and Yoshiyuki Kawazoe
34. $\text{ErRh}_2\text{B}_2\text{C}$ の相安定性および性質……………946
第9回日本フラックス成長研究発表会
高知大学 朝倉キャンパス (2014.12.11-12) 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
35. 偏極中性子散乱装置 POLANO での磁場環境評価……………948
日本中性子科学会第14回年会 (JSNS2014)
北海道立道民活動センター かでる 2・7(2014.12.11-12) No.P-58 (Poster)
大山研司、南部光江、横尾哲也、大河原学、猪野隆、伊藤晋一、
岩佐和晃、奥隆之、吉良弘
36. 正二十面体準結晶に対するインフレーションルール……………949
第19回準結晶研究会
宮城 ラフォーレ蔵王 (2014.12.21-23) (Oral)
藤田伸尚

<2015年>

1. β 型 Ti-X 合金の電子状態と相安定性の理論解析……………951
日本金属学会チタン製造プロセスと材料機能研究会第1回講演会
関西大学 千里山キャンパス (2015.1.30) (Oral)
佐原亮二、江村聡、土谷浩一
2. 太陽電池用モノライク Si 中の転位発生抑制のための応力解析……………952
第62回応用物理学会春季学術講演会
東海大学 湘南キャンパス (2015.3.11-14) No.12a-A18-8 (Oral)
杉岡翔太、沓掛健太郎、出浦桃子、大野裕、米永一郎
3. タイプ2構造 Sn クラスレートの電子状態に対する元素添加効果……………953
第62回応用物理学会春季学術講演会
東海大学 湘南キャンパス (2015.3.11-15) No.08-104 (Oral)
赤井光治、岸本堅剛、小柳剛、山本節夫
4. Fe-Ni 合金における熱膨張係数の特異な温度挙動に対する
第一原理クラスター変分法計算……………954
日本金属学会 春期講演大会 (2015)
東京大学 駒場Iキャンパス (2015.3.18-20) No.107 (Oral)
山田亮、毛利哲夫、陳迎
5. 移流集積法によるコロイド凝固過程における不純物挙動の数値実験……………955
日本金属学会 春期講演大会 (2015)
東京大学 駒場Iキャンパス (2015.3.18-20) No.112 (Oral)
寺田弥生
6. Local-Energy and Local-Stress Study of Fe/TiC Coherent Interfaces……………956
日本金属学会 春期講演大会 (2015)
東京大学 駒場Iキャンパス (2015.3.18-20) No.203 (Oral)
Vikas Sharma、香山正憲、田中真悟、椎原良典
7. Phase Stabilities of Dy-Nd and Dy-Fe Binary Systems……………957
日本金属学会 春期講演大会 (2015)
東京大学 駒場Iキャンパス (2015.3.18-20) No.S1・40 (Oral)
Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Ken Suzuki and Hideo Miura

8. α 鉄中の Al-N の原子間相互作用958
 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会
 東京大学 駒場 I キャンパス (2015.3.18-20) No.167 (Oral)
 赤田愛、Maaouia Souissi、沼倉 宏
9. 正方晶弾性率を考慮したラスマルテンサイト相の
 フェーズフィールドシミュレーション959
 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会
 東京大学 駒場 I キャンパス (2015.3.18-20) No.182 (Oral)
 吉田 啓太、村田純教、塚田祐貴、小山敏幸、Maaouia Souissi、沼倉宏
10. α 鉄中の炭素とバナジウムの原子間相互作用960
 日本鉄鋼協会第 169 回春季講演大会
 東京大学 駒場 I キャンパス (2015.3.18-20) No.PS-76 (Poster)
 松岡厚志、沼倉宏
11. フラストレーション系の新奇スピントロポロジーの理論961
 日本物理学会 第 70 回年次大会
 早稲田大学 早稲田キャンパス (2015.3.21-24) No.21pAD-8 (Symposium)
 中野博生
12. 外部電場下における Co/Pt(111)超薄膜のキュリー温度963
 日本物理学会 第 70 回年次大会
 早稲田大学 早稲田キャンパス (2015.3.21-24) No.21pAB-11 (Oral)
 大場幹斗、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳
13. 詳細釣り合い条件を満たす遺伝的アルゴリズムの古典スピン系 MC への応用(2)964
 日本物理学会 第 70 回年次大会
 早稲田大学 早稲田キャンパス (2015.3.21-24) No.24aA H-7 (Oral)
 志田和人
14. 希土類金属超薄膜における結晶磁気異方性の第一原理計算965
 日本物理学会 第 70 回年次大会
 早稲田大学 早稲田キャンパス (2015.3.21-24) No.21aPS-63 (Poster)
 池浦雄志、名和憲嗣、中村浩次、秋山亨、伊藤智徳

15. Searching Reaction Path of Dissociative Adsorption of a Hydrogen Fluoride Molecule at Hydrofluoric acid/Si(111) Interfaces using the First-principles Metadynamics Simulation966
- 日本化学会 第95 春季年会 (2015)
日本大学 理工学部船橋キャンパス/薬学部(2015.3.26-29) No.1B6-30
(Oral)
Hitomi Kanamori, Yoshitada Morikawa, Kouji Inagaki, Hidetoshi Kizaki
and Yuji Hamamoto

V. 新聞記事

<2014 年>

1. 高校生スパコン作り・先端大で体験合宿始まる
北陸中日新聞(2014.8.26)
2. 高校生がスパコン自作に挑む
北國新聞(2014.8.26)
3. 氷表面の擬似液体層 挙動解明
科学新聞(2014.9.5)

<2015 年>

1. 水素大量貯蔵の化合物 東北大 クロム原子に7つ結合
日経産業新聞(2015.3.30)

VI. 雑誌等掲載解説記事

<2014 年>

1. Fe-Pt の L₁₀ 相の相安定性、相平衡の第一原理計算967
ふえらむ, **19**[3] pp.6-12
毛利哲夫、陳迎
2. スピノーダルオーダーリングの第一原理計算974
まてりあ, **53**[9] pp. 394-399
毛利哲夫
3. 全電子混合基底法プログラム TOMBO を活用した材料科学980
まてりあ, **53**[9] pp. 400-404
佐原亮二、小野頌太、大野かおる
4. 磁性の根源 —85 年も続いた誤解—985
金属, **84**[9] pp.12-24
川添良幸

VII. 書籍

<2014 年>

1. 全電子混合基底法プログラムを用いた水素貯蔵材料の設計999
水素利用技術集成(2014) pp. 143 -148
佐原亮二、水関博志、Marcel H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸

VIII. 表彰・授与

1. 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 1007
日立 IT ユーザ会 第 51 回大会(2014.6.5)
「一般論文優秀賞」
五十嵐伸昭、大滝大河、一関京子

IX. 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 1009
2. 東北大学金属材料研究所構内図 1010
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図 1011