

2020 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

(2020 年 4 月～2021 年 3 月)

目 次

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

I. 研究内容概要

<2019 年>

1. 情報駆動型実験計画に基づいた第一原理計算による触媒性能予測モデルの構築…… 1
広島大学・先端理工系科学研究科 岡田健太

<2020 年>

1. ホウ素錯体を電子アクセプタとする高性能 n 型半導体の開発 …………… 3
名古屋工業大学大学院工学研究科 小野克彦
2. 金属表面上の磁性分子のスピン状態及び半導体材料中の電子フォノン相互作用
に関する第一原理計算 …………… 6
分子科学研究所 南谷英美
3. 点欠陥の照射誘起移動過程の分子動力学計算 …………… 9
広島工業大学 佐藤裕樹
4. 結晶粒子形状制御のための表面安定性解析 …………… 12
信州大学先鋭材料研究所 椎葉寛将、手嶋勝弥

5. 分子と結晶の両方の全電子スペクトル計算プログラムの開発 15
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、Mohamad Khazaei
マレーシア・マラヤ大学 Khian-Hooi Chew
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
6. 第一原理分子動力学法による固体酸化物触媒の機能解明 18
東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 中山哲
7. Studies on the Correlation between Structures, Properties and Reactivity of Cluster
Complexes 22
豊田工業大学 市橋正彦、安松久登
九州大学大学院理学研究科 寺寄亨
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov
8. 固溶型合金ナノ粒子触媒の分子吸着特性 23
信州大学先鋭材料研究所 古山通久、難波優輔
9. ノンコリニア非磁性体の系統的な第一原理計算 26
東京大学新領域複雑理工専攻 Marie-Therese Huebsch
東京大学工学系物理工学専攻 野本拓也、有田亮太郎
東北大学金属材料研究所 鈴木通人
10. 界面や欠陥近傍における原子やイオンの伝導機構の解析 28
東京大学工学系研究科マテリアル工学専攻 清水康司、渡邊聡
11. 第一原理計算および量子多体計算に基づく多バンド系の超伝導機構 31
新潟大学理学部 大野義章
新潟大学大学院自然科学研究科 飯塚優人、関川卓也、齋藤雅樹、今野元、
猪熊祐輔、小林健太郎
12. 有限要素法を用いたタンゲステン材料の熱・応力構造解析 35
九州大学応用力学研究所 徳永和俊
13. くりこみ群に基づく有限温度 Bose-Einstein 凝縮相の低エネルギー励起の解析 37
北海道大学大学院理学研究院 北孝文

14. Sn ペロブスカイトの Sn 欠損に A サイトイオンが及ぼす影響 40
九州工業大学 飯久保智、奥村太一、奥村峻
電気通信大学 早瀬修二
15. 高分子溶融体流動のマルチスケールシミュレーション 42
京都大学工学研究科化学工学専攻 谷口貴志
京都大学化学研究所 佐藤健
16. Ta₂NiSe₅ の電子・格子相互作用の第一原理計算 47
東京大学光量子科学研究センター 篠原康
17. Ion transport mechanism in fast-ion conductors: Insights from molecular dynamics simulation 49
Mathematics for Advanced Materials Open Innovation Laboratory (MathAM-OIL),
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
Takeshi Nakanishi, Tamio Ikeshoji and Kartik Sau
Institute for Materials Research (IMR), Tohoku University Shigeyuki Takagi
18. Kitaev 量子スピン液体材料の汎関数繰り込み群による研究 53
東北大学金属材料研究所 福井毅勇、加藤雄介
19. 第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測 57
東京大学大学院工学系研究科 野本拓也、倉田伊織、松井彬
20. FMO 計算に基づく有効パラメータを用いる DPD シミュレーション 58
立教大学理学部 望月祐志、奥脇弘次
21. 磁壁移動における磁歪効果と高性能磁性材料の設計指針 60
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
22. 分子動力学シミュレーションによる複雑流体中のキャビテーション 65
東京大学物性研究所 浅野優太、野口博司
23. Unique Power-law Scaling in Nanoindentation Pop-ins 70
大阪大学 尾方成信

24. 磁性材料が示す非対角応答現象の解析手法の開発 72
明治大学理工学部 楠瀬博明、大岩陸人、新藤亮
東北大学金属材料研究所 柳有起
25. 強相関電子系における電子ネマティック及び超伝導の理論研究 74
名古屋大学大学院理学研究科 山川洋一
26. 第一原理計算による(100)面露出 CeO₂ ナノ立方体の表面構造と反応性の解明 76
名古屋大学大学院工学研究科 高見誠一
東北大学材料科学高等研究所 横哲
27. 界面和周波発生分光の理論解析に基づく溶液界面構造の微視的解明 81
東北大学大学院理学研究科 森田明弘、小泉愛
富山大学学術研究部工学系 石山達也
28. Be 架橋平面ジグザグシリセンナノリボン 85
東北大学大学院農学研究科 高橋まさえ
29. 有機導体・半導体の電子構造解析 87
東北大学大学院理学研究科 瀧宮和男、川畑公輔
30. 第一原理計算に基づくミディアムエントロピー合金の組織シミュレーション 93
東北大学多元物質科学研究所 榎木勝徳
31. A Study on oxidation initiation mechanism of hydrogen containing alloy surfaces under strain 95
National Institute of Technology, Sendai College, Natori Campus Nishith K. Das
32. マイナーアクチノイド混合酸化物系に対する状態図作成のための熱力学量評価 98
東北大学大学院工学研究科 宍戸博紀
33. 第一原理ハイスループット計算に基づく物質設計 100
東北大学理学研究科 是常隆

34. 粘弾性および弾塑性体のマルチスケールシミュレーション 102
東北大学理学研究科・金属材料研究所 川勝年洋
東北大学理学研究科 村島隆浩、森井洋平
35. 多価カチオン・デュアルカチオン電池用正極材料の物質探索 105
東北大学金属材料研究所 李弘毅、畠山拓也、市坪哲
36. 金属積層造形プロセスにおける溶融凝固挙動の解析 106
東北大学金属材料研究所 青柳健大
37. 籠状クラスター型錯イオンを有するクロソ系錯体水素化物におけるイオン伝導機構の解明 110
東北大学金属材料研究所 金相侖、高木成幸
38. 高水素配位錯体水素化物における新規固体イオニクスの開拓 112
東北大学金属材料研究所 高木成幸
東北大学材料科学高等研究所 池庄司民夫
39. フォノンバンドエンジニアリングによる Fe 系熱電変換材料の高性能化 114
東北大学金属材料研究所 岡本範彦、藤原浩輔、市坪哲
40. Calculation-driven design of off-equiatomic high-entropy alloys with enhanced solid-solution strengthening 116
Institute for Material Research, Tohoku University J. Li, K. Yamanaka and A. Chiba
41. セメント系材料の反応特性の理論解析 121
東北大学未来科学技術共同研究センター 長谷川史彦、川添良幸
Indian Institute of Science Abhishek Kumar Singn
SungkyunKwan University Viet Bui

42. 大規模第一原理計算による耐熱材料の相安定性と電子状態解析 …………… 123
 NIMS 佐原亮二、大塚秀幸、S. K. Bhattacharya
 KIST 水関博志
 IISER P. Ghosh、K. Kohli
 Brunel University London M. Souissi
 東北大学 古泉隆佑
43. High-precision free energy calculation and full first-principles phase diagram………… 124
 School of Engineering, Tohoku University Ying Chen, Arkapol Saengdeejing,
 Nguyen-Dung Tran, Theresa Davey, Qinqiang Zhang, Mariko Kadowaki,
 Zihao Wang
 School of Materials Science and Engineering Shanghai University Hao Wang
 Beijing University of Science and Technology Zhihao Yao, Lei Wang
 Institute of Fluid Physics Hua Y. Gneg
 Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences Ivan Štich
 NIMTE, Chinese Academy of Sciences Hubin Luo
44. 高信頼性第一原理シミュレーション計算によるマテリアルインフォマティクスを用
 いた新単結晶材料探索…………… 129
 東北大学未来科学技術共同研究センター 佐藤浩樹、川添良幸
 中国北京大学 王前、孫強
 Xi'an Jiaotong University Zhou Jian
45. 新規籠型構造及び二次元構造ナノ材料設計 …………… 134
 東北大学大学院医工学研究科 松木英敏
46. 大規模分子動力学シミュレーションによるマルチスケール現象の解明と新規材
 料設計への応用 …………… 138
 東北大学金属材料研究所 尾澤伸樹、大谷優介、許競翔、王楊、陳茜、
 上原周一、佐藤雄基、川浦正之、河原幸有美、小沼早紀、中村美穂、
 土子政貴、張静、劉暢、蘇怡心、小野寺建人、劉仲民、矢鳴晃人、
 清水界斗、渡辺瑛奈子、谷合凌輔、久保百司
47. 磁歪発電素子開発を目的とした新材料設計のための第一原理計算 …………… 143
 東北大学金属材料研究所 梅津理恵

48. 第一原理計算によるトポロジカル磁性体の巨大輸送現象の研究 146
 東北大学金属材料研究所 鈴木通人、柳有起、V.T.N. Huyen
49. ROLE OF NON-COVALENT INTERACTION IN DESCRIPTION OF THE
 ELECTRONIC, DYNAMIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF
 NANOPOROUS MATERIALS FOR ECO-FRIENDLY ENERGY APPLICATIONS .. 148
 Institute for Material Research, Tohoku University R. V. Belosludov
50. マルチスケール計算による多元材料の材料物性と相の安定性の研究とその理工
 学系高等教育への適用 II 153
 東北大学金属材料研究所計算物質科学人材育成コンソーシアム 寺田弥生
 ICMPE, France Jean-Claude Crivello
 Korea Institute of Materials Science, Korea Eun-Ae Choi
 Universidade Federal Fluminense, Brazil Paulo Rios、Assis Wesley、Alves Celso
 熊本大学大学院自然科学研究科 連川貞弘、白坂仁
 東北大学大学院工学研究科 吉見享祐、金子昂弘
 東北大学工学部 星崎航太郎
51. 固体熱電材料の熱伝導特性解析 158
 東京大学機械工学専攻 大西正人
52. Ultimate Impedance of Coherent Heat Conduction in Van Der Waals Graphene-MoS₂
 Heterostructures 160
 Department of Physics, Yunnan University Hu Shiqian
 Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo
 Junichiro Shiomi
53. Theoretical design toward abundant element nanocatalysts 165
 Faculty of Science, Hokkaido University A. Lyalin, S. Kumar, T. Iwasa and
 T. Taketsugu
54. フェムト秒 X 線パルスを用いた反応動力学イメージング理論の開拓 167
 理化学研究所光量子工学研究センター 山崎馨
55. Wannier 関数自動生成器の作成と精度検証 170
 東京大学物性研究所 吉見一慶

56. データ駆動手法によるシミュレーション加速と GPU 分子動力学計算整備 ……172
東京大学情報基盤センター 芝隼人
57. 軽元素 B, C, N 系積層原子膜の物性解明と電子デバイス材料への応用 ……174
東京工業大学理学院 斎藤晋、藤本義隆、芳賀太史、伊藤智哉
58. 水素燃料電池の新型カソード材料の活性予測 ……178
東京大学物性研究所 杉野修、春山潤、M. Shibghatullah、A. E. Flaviano
59. 富岳電池課題「ESM-RISM 法の電気化学界面反応への応用」 ……180
産業技術総合研究所計算科学研究センター 萩原聡、安藤康伸、大谷実

II. 原著論文

<2017年>

1. Athermal migration of vacancies in iron and copper induced by electron irradiation ··182
Philos. Mag., 97[9] (2017) pp.638-656
Y. Satoh, T. Sohtome, H. Abe, Y. Matsukawa and S. Kano

7. Sensing surface lattice strain with Kondo resonance of single Co adatom246
Appl. Phys. Lett., 116[5] (2020) Art.No.051604
K. Iwata, T. Miyamachi, E. Minamitani and F. Komori
8. Microwave-assisted synthesis of nano Hf- and Zr-based metal-organic frameworks for enhancement of curcumin adsorption250
Microporous Mesoporous Mater., 298 (2020) Art.No.110064
Y. Thi Dang, Hieu Trung Hoang, Hieu Cao Dong, Kim-Binh Thi Bui, Linh Ho Thuy Nguyen, Thang Bach Phan, Yoshiyuki Kawazoe and Tan Le Hoang Doan
9. A detailed analysis of the spin-crossover reaction of H₂S binding to heme and the six-coordinated FeP(Im)-HS⁻ porphyrin complex257
J. Inorg. Biochem., 206 (2020) Art.No.111049
B. D. Ostojić, P. Schwerdtfeger, A. Nakayama, J. Hasegawa and D. S. Đorđević
10. Modulation of nearly free electron states in hydroxyl-functionalized MXenes: a first-principles study268
J. Mater. Chem. C, 8[15] (2020) pp.5211-5221
Jiaqi Zhou, Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Vei Wang, Thomas D. Kühne, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Yunye Liang
11. Detecting electron-phonon coupling during photoinduced phase transition279
Phys. Rev. B, 103[12] (2021) Art.No.L121105
Takeshi Suzuki, Yasushi Shinohara, Yangfan Lu, Mari Watanabe, Jiadi Xu, Kenichi L. Ishikawa, Hide Takagi, Minoru Nohara, Naoyuki Katayama, Hiroshi Sawa, Masami Fujisawa, Teruto Kanai, Jiro Itatani, Takashi Mizokawa, Shik Shin and Kozo Okazaki
12. Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines285
Phys. Rev. Research, 2[1] (2020) Art.No.013319
Koki Kitai, Jiang Guo, Shenghong Ju, Shu Tanaka, Koji Tsuda, Junichiro Shiomi and Ryo Tamura

13. Partially Oxidized $Ti_3C_2T_x$ MXenes for Fast and Selective Detection of Organic Vapors at Part-per-Million Concentrations 295
ACS Appl. Nano Mater., 3[4] (2020) pp.3195-3204
Hanna Pazniak, Ilya A. Plugin, Michael J. Loes, Talgat M. Inerbaev,
Igor N. Burmistrov, Michail Gorshenkov, Josef Polcak, Alexey S. Varezchnikov,
Martin Sommer, Denis V. Kuznetsov, Michael Bruns, Fedor S. Fedorov,
Nataliia S. Vorobeva, Alexander Sinitskii and Victor V. Sysoev

14. Self-Formed Double Tribolayers Play Collaborative Roles in Achieving Superlow Friction in an Aqueous Environment 305
J. Phys. Chem. C, 124[15] (2020) pp.8295-8303
Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Naoki Takahashi, Kenta Akagami, Satoshi Sakaki,
Yang Wang, Nobuki Ozawa, Takahiro Hatano, Koshi Adachi and Momoji Kubo

15. Clear evidence for element partitioning effects in a Ti-6Al-4V alloy by the first-principles phase field method 314
J. Phys.: Cond. Mat., 32[26] (2020) Art.No.264001
Thi Nu Pham, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara, Riichi Kuwahara and
Swastibrata Bhattacharyya

16. Experimental and Computational Studies of the Structure of CdSe Magic-Size Clusters 323
J. Phys. Chem. A, 124[17] (2020) pp.3398-3406
Igor Dmitruk, Rodion V. Belosludov, Andriy Dmytruk, Yasuto Noda, Yuri Barnakov,
Yeon-Su Park and Atsuo Kasuya

17. Existence of weakly interacting OH bond at air/water interface 332
J. Chem. Phys., 152 (2020) Art.No.134703
Tatsuya Ishiyama

18. Boron nitride for enhanced oxidative dehydrogenation of ethylbenzene 342
J. Energy Chem., 57 (2021) pp.477-484
Rui Han, Jiangyong Diao, Sonu Kumar, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu,
Gilberto Casillas, Christopher Richardson, Feng Liu, Chang Won Yoon,
Hongyang Liu, Xudong Sun and Zhenguo Huang

19. Stability Calculation of Cu₄Ti Intermetallic Compounds with Addition of 3d Transition Metal in Cu–Ti Alloy by Density Functional Theory 350
Journal of Japan Institute of Copper, 59[1] (2020) pp.43-47
Eun–Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi, Jehyun Lee and Sung Hwan Lim

20. Development of a Transferable ReaxFF Parameter Set for Carbon- and Silicon-Based Solid Systems 355
J. Phys. Chem. C, 124[18] (2020) pp.10007-10015
Yang Wang, Yuqing Shi, Qiang Sun, Kang Lu, Momoji Kubo and Jingxiang Xu

21. Role of divalent cation (Ba) substitution in the Li⁺ ion conductor LiTi₂(PO₄)₃: a molecular dynamics study 364
Phys. Chem. Chem. Phys., 22[26] (2020) pp.14471-14479
Kartik Sau, Tamio Ikeshoji and Supriya Roy

22. Electron Transfer Mechanism at the Oil/Water Interface Revealed by Multidimensional Free Energy Calculations 374
J. Phys. Chem. B, 124[18] (2020) pp.3811-3827
Tomonori Hirano and Akihiro Morita

23. Penta-BCN: A New Ternary Pentagonal Monolayer with Intrinsic Piezoelectricity 391
J. Phys. Chem. Lett., 11[9] (2020) pp.3501-3506
Kexian Zhao, Yaguang Guo, Yiheng Shen, Qian Wang, Y. Kawazoe and Puru Jena

24. Exotic properties of materials and the necessity to invoke the dimension of angle (θ) and the orbital degrees of freedom of s electrons 397
Int. J. Computational Science and Engineering, 9[1] (2020) Art.No.2050003
K. Iyakutti, Y. Kawazoe, V. J. Surya, I. Lakshmi and R. Rajeswarapalanichamy

25. Roles of Interstitial Nitrogen, Carbon, and Boron in Steel Corrosion: Generation of Oxyanions and Stabilization of Electronic Structure 409
J. Electrochem. Soc., 167 (2020) Art.No.081503
Mariko Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Gerald S. Frankel, Takashi Doi, Kaori Kawano, Yu Sugawara and Nobuyoshi Hara

26. Influences of Multicenter Bonding and Interstitial Elements on Twinned γ -TiAl Crystal \cdots 424
Materials, 13[9] (2020) Art.No.2016
Zehang Fu, Jinkai Wang, HaoWang, Xiaogang Lu, Yanlin He and Ying Chen
27. Design of tetracene-based metallic 2D carbon materials for Na- and K-Ion batteries \cdots 437
Appl. Surf. Sci., 521 (2020) Art.No.146456
Umer Younis, Imran Muhammad, Yoshiyuki Kawazoe and Qiang Sun
28. A Molecular Dynamics Study on Alumina/Carbon Nanotube Composite: How Does Annealing Affect Mechanical Properties? \cdots 443
J. Comput. Chem. Jpn., 18[5] (2019) pp.259-262
Yixin Su, Jing Zhang, Qian Chen, Yang Wang, Narumasa Miyazaki, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
29. Pseudorotating hydride complexes with high hydrogen coordination: A class of rotatable polyanions in solid matter \cdots 447
Appl. Phys. Lett., 116[17] (2020) Art.No.173901
Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Toyoto Sato and Shin-ichi Orimo
30. Refractive index of nanoconfined water reveals its anomalous physical properties \cdots 452
Nanoscale Horiz., 5 (2020) pp.1016-1024
Thu H. H. Le, Akihiro Morita and Takuo Tanaka
31. Significance of powder feedstock characteristics in defect suppression of additively manufactured Inconel 718 \cdots 461
Addit. Manuf., 34 (2020) Art.No.101277
Yufan Zhao, Kenta Aoyagi, Yohei Daino, Kenta Yamanaka and Akihiko Chiba
32. An atomistic study of the structural changes in a Zr-Cu-Ni-Al glass-forming liquid on vitrification monitored in-situ by X-ray diffraction and molecular dynamics simulation \cdots 474
Intermetallics, 122 (2020) Art.No.106795
D. V. Louzguine-Luzgin, K. Georgarakis, J. Andrieux, L. Hennet, T. Morishita, K. Nishio and R. V. Belosludov

33. The nano-structural inhomogeneity of dynamic hydrogen bond network of TIP4P/2005 water482
 Sci. Rep., 10[1] (2020) Art.No.7323
 Vladimir Belosludov, Kirill Gets, Ravil Zhdanov, Valery Malinovsky, Yulia Bozhko, Rodion Belosludov, Nikolay Surovtsev, Oleg Subbotin and Yoshiyuki Kawazoe
34. Synthesis and electrical conductivity of Na₃B₂₀495
 Solid State Sci., 102 (2020) Art.No.106166
 Haruhiko Morito, Syouta Shibano, Takahiro Yamada, Takuji Ikeda, Masami Terauchi, Rodion V. Belosludov and Hisanori Yamane
35. Design of novel pentagonal 2D transitional-metal sulphide monolayers for hydrogen evolution reaction 500
 Int. J. Hydrogen Energy, 45[32] (2020) pp.16201-16209
 Kin Long Ao, Yangfan Shao, Iat Neng Chan, Xingqiang Shi, Yoshiyuki Kawazoe, Ming Yang, Kar Wei Ng and Hui Pan
36. "Heavy-atom effects" in the parent [1]benzochalcogenopheno [3,2-b][1]benzochalcogenophene system 509
 J. Mater. Chem. C, 8[43] (2020) pp.15119-15127
 Chengyuan Wang, Mamatimin Abbas, Guillaume Wantz, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
37. Synthesis and Photovoltaic Properties of Boron β-Ketoiminate Dyes Forming a Linear Donor-π-Acceptor Structure 518
 Chem. Asian J., 15[13] (2020) pp.1982-1989
 Yuki Sakura, Fumina Yumioka, Takashi Funaki and Katsuhiko Ono
38. Bi-layering at ionic liquid surfaces: a sum-frequency generation vibrational spectroscopy- and molecular dynamics simulation-based study 526
 Phys. Chem. Chem. Phys., 22 (2020) pp.12565-12576
 Takashi Iwahashi, Tatsuya Ishiyama, Yasunari Sakai, Akihiro Morita, Doseok Kim and Yukio Ouchi

39. Machine learning analysis of tunnel magnetoresistance of magnetic tunnel junctions with disordered MgAl_2O_4 538
 Phys. Rev. Research, 2[2] (2020) Art.No.023187
 Shenghong Ju, Yoshio Miura, Kaoru Yamamoto, Keisuke Masuda, Ken-ichi Uchida and Junichiro Shiomi
40. Influence of interatomic interactions on the mechanical properties of face-centered cubic multicomponent Co–Ni–Cr–Mo alloys 547
 Materialia, 12 (2020) Art.No.100742
 Jiaxiang Li, Kenta Yamanaka and Akihiko Chiba
41. Non-regular hexagonal 2D carbon, an allotrope of graphene: a first-principles computational study 559
 J. Mol. Model., 26[6] (2020) Art.No.150
 K. Iyakutti, V. J. Surya, I. Lakshmi, R. Rajeswarapalanichamy and Y. Kawazoe
42. Electronic States of Al–Mg–Zn Quasicrystal and Its Approximant Based on First-Principles Calculations 564
 Phys. Status Solidi B, 257[11] (2020) Art.No.2000108
 Masaki Saito, Takuya Sekikawa and Yoshiaki Ōno
43. 多価カチオンを利用した新型蓄電デバイス開発に向けた基礎的研究 568
 まてりあ, 59[8] (2020) pp.413-421
 李弘毅、下川航平、岡本範彦、市坪哲
44. Carbon annealed HPHT-hexagonal boron nitride: Exploring defect levels using 2D materials combined through van der Waals interface 577
 Carbon, 167 (2020) pp.785-791
 Momoko Onodera, Miyako Isayama, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Satoru Masubuchi, Rai Moriya, Taishi Haga, Yoshitaka Fujimoto, Susumu Saito and Tomoki Machida
45. *In Situ* Monitoring of the Unsaturated Phospholipid Monolayer Oxidation in Ambient Air by HD-SFG Spectroscopy 584
 J. Phys. Chem. B, 124[25] (2020) pp.5246-5250
 Ken-ichi Inoue, Chunji Takada, Lin Wang, Akihiro Morita and Shen Ye

46. Spontaneous antisymmetric spin splitting in noncollinear antiferromagnets without spin-orbit coupling 589
 Phys. Rev. B, 101[22] (2020) Art.No.220403(R)
 Satoru Hayami, Yuki Yanagi and Hiroaki Kusunose
47. Machine-Learning-Optimized Aperiodic Superlattice Minimizes Coherent Phonon Heat Conduction 595
 Phys. Rev. X, 10[2] (2020) Art.No.021050
 Run Hu, Sotaro Iwamoto, Lei Feng, Shenghong Ju, Shiqian Hu, Masato Ohnishi, Naomi Nagai, Kazuhiko Hirakawa and Junichiro Shiomi
48. Induced Magnetism of the MoS₂ Monolayer during the Transition Metal (Fe/Ni) Bombardment Process: A Nonadiabatic *Ab Initio* Collision Dynamics Investigation ··· 608
 ACS Omega, 5[26] (2020) pp.16139-16148
 Thi H. Ho, Hieu T. Hoang, Hieu C. Dong, Yoshiyuki Kawazoe and Hung M. Le
49. $1/f^2$ spectra of decoherence noise on ⁷⁵As nuclear spins in bulk GaAs 618
 Sci. Rep., 10 (2020) Art.No.10674
 Susumu Sasaki, Takanori Miura, Kosuke Ikeda, Masahiro Sakai, Takuya Sekikawa, Masaki Saito, Tatsuro Yuge and Yoshiro Hirayama
50. Reactive Molecular Dynamics Simulations of Wear and Tribochemical Reactions of Diamond like Carbon Interfaces with Nanoscale Asperities under H₂ Gas: Implications for Solid Lubricant Coatings 627
 ACS Appl. Nano Mater., 3[7] (2020) pp.7297-7304
 Yang Wang, Yixin Su, Jing Zhang, Qian Chen, Jingxiang Xu, Shandan Bai, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Maria-Isabel De Barros Bouchet, Jean Michel Martin, Koshi Adachi and Momoji Kubo
51. Two-path phonon interference resonance induces a stop band in a silicon crystal matrix with a multilayer array of embedded nanoparticles 635
 Phys. Rev. B, 102[2] (2020) Art.No.024301
 Shiqian Hu, Lei Feng, Cheng Shao, Ivan A. Strelnikov, Yuriy A. Kosevich and Junichiro Shiomi

52. Carbonyl-Terminated Quinoidal Oligothiophenes as p-Type Organic Semiconductors ····643
Materials, 13[13] (2020) Art.No.3020
Takato Asoh, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
53. Magnetic and electronic properties of 2D TiX_3 ($X = F, Cl, Br$ and I) ······658
Phys. Chem. Chem. Phys., 22[31] (2020) pp.17632-17638
Jiazhong Geng, Iat Neng Chan, Haoqiang Ai, Kin Ho Lo, Yoshiyuki Kawazoe,
Kar Wei Ng and Hui Pan
54. Transformations with inhomogeneous nucleation and growth velocity·····665
J. Mater. Res. Technol., 9[5] (2020) pp.9868-9881
Mariana Sizenando Lyrioa, Gabriella Maria Silveira de Sá, Harison da Silva Ventura,
Wesley Luiz da Silva Assis, Elena Villa and Paulo Rangel Rios
55. Calphad Modeling of LRO and SRO Using *ab initio* Data·····679
Metals, 10[8] (2020) Art.No.998
Masanori Enoki, Bo Sundman, Marcel H. F. Sluiter, Malin Selleby and
Hiroshi Ohtani
56. First-Principles Study on Stacking Fault Energy of γ -Fe–Mn Alloys ······709
Met. Mater. Int., (2020)
Chengjun Wang, Wujie Zu, Hao Wang and Yang Wang
57. Hydrogen-Enhanced Vacancy Diffusion in Metals ······718
J. Phys. Chem. Lett., 11[17] (2020) pp.7015-7020
Jun-Ping Du, W. T. Geng, Kazuto Arakawa, Ju Li and Shigenobu Ogata
58. ミクロな多極子による電子物性の表現論(その3)·····724
固体物理, 55 (2020) pp.379-396
速水賢、八城愛美、柳有起、楠瀬博明
59. Role of Methane as a Second Guest Component in Thermodynamic Stability and Isomer
Selectivity of Butane Clathrate Hydrates ······742
J. Phys. Chem. C, 124[34] (2020) pp.18474-18481
Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Kirill V. Gets, Yulia Yu. Bozhko,
Vladimir R. Belosludov and Y. Kawazoe

60. Theoretical prediction of superconductivity in monolayer h-BN doped with alkaline-earth metals (Ca, Sr, Ba) 750
 J. Phys.: Condens. Matter, 32[43] (2020) Art.No.435002
 Nao H. Shimada, E. Minamitani and S. Watanabe
61. Anomalous Hall effect in κ -type organic antiferromagnets 759
 Phys. Rev. B, 102[7] (2020) Art.No.075112
 Makoto Naka, Satoru Hayami, Hiroaki Kusunose, Yuki Yanagi, Yukitoshi Motome and Hitoshi Seo
62. Ultimate suppression of thermal transport in amorphous silicon nitride by phononic nanostructure 770
 Sci. Adv., 6[39] (2020) Art.No.eabc0075
 Naoki Tambo, Yuxuan Liao, Chun Zhou, Elizabeth Michiko Ashley, Kouhei Takahashi, Paul F. Nealey, Yasuyuki Naito and Junichiro Shiomi
63. Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins 778
 Nat. Commun., 11[1] (2020) Art.No.4177
 Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Takahiro Hatano and Shigenobu Ogata
64. First-Principles Molecular Dynamics Study of Silicon-Based Ceramics: Different Tribochemical Reaction Mechanisms during the Running-in Period of Silicon Nitride and Silicon Carbide 787
 J. Phys. Chem. C, 124[37] (2020) pp.20079-20089
 Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Koshi Adachi and Momoji Kubo
65. Origin of Fast Ion Conduction in Na₃PS₄: Insight from Molecular Dynamics Study ... 798
 J. Phys. Chem. C, 124[38] (2020) pp.20671-20681
 Kartik Sau and Tamio Ikeshoji
66. Physical Properties and Characterization of the Binary Clathrate Hydrate with Methane + 1,1,1,3,3-Pentafluoropropane (HFC-245fa) + Water 809
 J. Phys. Chem. C, 124[38] (2020) pp.20736-20745
 Masamichi Kodera, Tomoyuki Matsueda, Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Vladimir R. Belosludov, Satoshi Takeya, Saman Alavi and Ryo Ohmura

67. Potential of porous nodal-line semi-metallic carbon for sodium-ion battery anode.....819
 J. Power Sources, 478 (2020) Art.No.228746
 Yupeng Shen, Qian Wang, Y. Kawazoe and Puru Jena
68. Tuning the electronic and magnetic properties of pentagraphene through the C1 vacancy... 825
 2D Mater., 7[4] (2020) Art.No.045024
 Aaditya Manjanath, Chao-Ping Hsu and Yoshiyuki Kawazoe
69. Experimental and *Ab Initio* Studies of Intrinsic Defects in “Antizeolite” Borates with a
 $Ba_{12}(BO_3)_6^{6+}$ Framework and Their Influence on Properties835
 Inorg. Chem., 59[18] (2020) pp.13598-13606
 Tatyana B. Bekker, Talgat M. Inerbaev, Alexander P. Yelisseyev,
 Vladimir P. Solntsev, Sergey V. Rashchenko, Alexey V. Davydov, Anton F. Shatskiy
 and Konstantin D. Litasov
70. Lattice Dynamics Study of the Thermal Expansion of C_3H_8 -, CH_4 -, CF_4 -, CO_2 -, Xe -, and
 N_2 -Hydrates 844
 Energy Fuels, 34[10] (2020) pp.12771-12778
 Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Yulia Y. Bozhko, Kirill V. Gets,
 Oleg S. Subbotin, Yoshiyuki Kawazoe and Vladimir R. Belosludov
71. First-principles-only CALPHAD phase diagram of the solid aluminium-nickel (Al-Ni)
 system 852
 Calphad, 71 (2020) Art.No.102008
 Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing and Ying Chen
72. Analytical Modeling and Computer Simulation of the Transformation of Ellipsoids
 Nucleated on Random Parallel Planes..... 869
 Mater. Res., 23[4] (2020) Art.No.e20200164
 Gabriella Maria Silveira de Sá, Harison da Silva Ventura,
 Wesley Luiz da Silva Assis, Elena Villa and Paulo Rangel Rios

73. Quadrupole Contribution of C=O Vibrational Band in Sum Frequency Generation Spectra of Organic Carbonates 879
J. Phys. Chem. Lett., 11[20] (2020) pp.8527-8531
Lin Wang, Wataru Mori, Akihiro Morita, Masato Kondoh, Masanari Okuno and Taka-aki Ishibashi
74. Mechanistic Study on Deoxydehydration and Hydrogenation of Methyl Glycosides to Dideoxy Sugars over a $\text{ReO}_x\text{-Pd/CeO}_2$ Catalyst 884
ACS Catal., 20[10] (2020) pp.12040-12051
Ji Cao, Masazumi Tamura, Ryu Hosaka, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige
75. Complete Multipole Basis Set for Single-Centered Electron Systems 896
J. Phys. Soc. Jpn., 89[10] (2020) Art.No.104704
Hiroaki Kusunose, Rikuto Oiwa and Satoru Hayami
76. The electronic structures and magnetic properties of mixed-valence Fe-based metal-organic VNU-15 frameworks: a theoretical study from linear response DFT+U calculations 906
RSC Adv., 10[57] (2020) pp.34690-34701
Diem Thi-Xuan Dang, Hieu Cao Dong, Yoshiyuki Kawazoe, Jer-Lai Kuo and Duc Nguyen-Manh
77. Molecular dynamics simulation of soundwave propagation in a simple fluid 918
J. Chem. Phys., 153[12] (2020) Art.No.124504
Yuta Asano, Hiroshi Watanabe and Hiroshi Noguchi
78. Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation of the Wear Mechanism of Cyclic Polymer Brushes 926
Chem. Lett., 49[10] (2020) pp.1185-1188
Zhongmin Liu, Yusuke Ootani, Shuichi Uehara, Jingxiang Xu, Yang Wang, Narumasa Miyazaki, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

79. Metastable oxysulfide surface formation on $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ single crystal particles by carbothermal reaction with sulfur-doped heterocarbon nanoparticles: new insight into their structural and electrochemical characteristics, and their potential applications ...931
J. Mater. Chem. A, 8[42] (2020) pp.22302-22314
Dae-Wook Kim, Nobuyuki Zettsu, Hiromasa Shiiba, Gabriel Sánchez-Santolino, Ryo Ishikawa, Yuichi Ikuhara and Katsuya Teshima
80. Potential of low-resistivity Cu_2Mg for highly scaled interconnects and its challenges ... 944
Appl. Surf. Sci., 537 (2021) Art.No.148035
Linghan Chen, Qian Chen, Daisuke Ando, Yuji Sutou, Momoji Kubo and Junichi Koike
81. 温度可変中赤外分光法と分子動力学シミュレーションを用いた高分子中の水の再結晶化メカニズムの解析951
分子シミュレーション学会アンサンブル, 22 (2020) pp.304-309
八十島亘宏、石山達也、源明誠
82. *Cmme*-SnS: a two-dimensional tin sulfide nanosheet957
J. Mater. Chem. A, 8 (2020) pp.21219-21226
Babu Ram and Hiroshi Mizuseki
83. Extending nudged elastic band method to reaction pathways involving multiple spin states965
J. Chem. Phys., 153 (2020) Art.No.134114
Liming Zhao, K-jiro Watanabe, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, Xin Xu and Jun-ya Hasegawa
84. Asymmetric Hydrogen-Bonding Structure at a Water/Ice Interface974
J. Phys. Chem. C, 124[42] (2020) pp.23287-23294
Tatsuya Ishiyama and Kazuya Kitanaka
85. Boosting Electrocatalytic HER Activity of 3D Interconnected CoSP via Metal Doping: Active and Stable Electrocatalysts for pH-Universal Hydrogen Generation982
Chem. Mater., 32[22] (2020) pp.9591-9601
Viet Q. Bui, Ashwani Kumar, Huong T. D. Bui, Jinsun Lee, Yosep Hwang, Hung M. Le, Yoshiyuki Kawazoe and Hyoyoung Lee

86. 18 and 12 – Member carbon rings (cyclo[n]carbons) – A density functional study993
 Mater. Sci. Eng., B, 263 (2021) Art.No.114895
 K. Iyakutti, V. J. Surya, I. Lakshmi, R. Rajeswarapalanichamy and Y. Kawazoe
87. Catalytic Mechanism of Liquid-Metal Indium for Direct Dehydrogenative Conversion of Methane to Higher Hydrocarbons998
 ACS Omega, 5[43] (2020) pp.28158-28167
 Yuta Nishikawa, Yuhki Ohtsuka, Hitoshi Ogihara, Rattanawalee Rattanawan, Min Gao, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa and Ichiro Yamanaka
88. Transition Temperature of Superconductivity in Sodium Tungsten Bronze—Theoretical Study Based on First-principles Calculations— 1008
 J. Phys. Soc. Jpn., 89 (2020) Art.No.113704
 Kazuhiro Sano, Yoshihiro Nitta and Yoshiaki Ōno
89. Influence and Sensitivity of Temperature and Microstructure on the Fluctuation of Creep Properties in Ni-Base Superalloy 1013
 Materials, 13[21] (2020) Art.No.4758
 Zhihao Yao, Biao Zhou, Kaijun Yao, Hongying Wang, Jianxin Dong and Theresa Davey
90. Stacking and curvature-dependent behaviors of electronic transport and molecular adsorptions of graphene: A comparative study of bilayer graphene and carbon nanotube 1031
 Appl. Surf. Sci. Adv., 1 (2020) Art.No.100028
 Yoshitaka Fujimoto and Susumu Saito
91. Designing thermal functional materials by coupling thermal transport calculations and machine learning 1036
 J. Appl. Phys., 128[16] (2020) Art.No.161102
 Shenghong Ju, Shuntaro Shimizu and Junichiro Shiomi
92. A study of extended-to-Localized transition of electronic states of fluid mercury around the metal-to-insulator transition region using the framework of multifractal analysis 1052
 J. Non-Cryst. Solids, 553 (2020) Art.No.120468
 Kentaro Kobayashi, Takuya Sekikawa and Kenji Maruyama

93. Bottom-up design of spin-split and reshaped electronic band structures in antiferromagnets without spin-orbit coupling: Procedure on the basis of augmented multipoles 1060
 Phys. Rev. B, 102[14] (2020) Art.No.144441
 Satoru Hayami, Yuki Yanagi and Hiroaki Kusunose
94. Comment on “Toward Unraveling the Puzzle of Sum Frequency Generation Spectra at Interface of Aqueous Methanol Solution: Effects of Concentration-Dependent Hyperpolarizability” 1084
 J. Phys. Chem. C, 124[45] (2020) pp.25160-25162
 Tatsuya Ishiyama, Shinya Takagi, Tomonori Hirano, Lin Wang and Akihiro Morita
95. Phase Stability in Nickel Phosphides at High Pressures 1087
 ACS Earth Space Chem., 4 (2020) pp.1978-1984
 Talgat M. Inerbaev, Nursultan Sagatov, Dinara Sagatova, Pavel N. Gavryushkin, Abdirash T. Akilbekov and Konstantin D. Litasov
96. 微視的多極子の一般化と秩序および交差相関物性 1094
 固体物理, 55 (2020) pp.523-534
 楠瀬博明、速水賢
97. Development of quadrupole susceptibility automatic calculator in sum frequency generation spectroscopy and application to methyl C-H vibrations 1106
 J. Chem. Phys., 153 (2020) Art.No.174705
 Wataru Mori, Lin Wang, Yamato Sato and Akihiro Morita
98. Atomistic origin of high-concentration Ce^{3+} in {100}-faceted Cr-substituted CeO_2 nanocrystals 1120
 Acta Mater., 203 (2021) Art.No.116473
 Xiaodong Hao, Akira Yoko, Kazutoshi Inoue, Yang Xu, Mitsuhiro Saito, Chunlin Chen, Gimyeong Seong, Takaaki Tomai, Seiichi Takami, Alexander L. Shluger, Bingshe Xu, Tadafumi Adschiri and Yuichi Ikuhara
99. クラスター多極子法と電子状態計算による反強磁性体の物性解析 1130
 固体物理, 55[11] (2020) pp.561-572
 鈴木通人、柳有起、有田亮太郎

100. A stable metallic 3D porous BPC₂ as a universal anode material for Li, Na, and K ion batteries with high performance..... 1142
 J. Mater. Chem. A, 8[48] (2020) pp.25824-25830
 Umer Younis, Imran Muhammad, Fizzah Qayyum, Yoshiyuki Kawazoe and Qiang Sun
101. Generation of “Graphene Arch-Bridge” on a Diamond Surface by Si Doping: A First-Principles Computational Study..... 1149
 J. Phys. Chem. C, 124[48] (2020) pp.26379-26386
 Shandan Bai, Jingxiang Xu, Yang Wang, Qi Zhang, Takeshi Tsuruda, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Jean Michel Martin and Momoji Kubo
102. Hydrodeoxygenation of Guaiacol to Phenol over Ceria-Supported Iron Catalysts..... 1157
 ACS Catal., 24[10] (2020) pp.14624-14639
 Congcong Li, Yoshinao Nakagawa, Masazumi Tamura, Akira Nakayama and Keiichi Tomishige
103. Ultimate impedance of coherent heat conduction in van der Waals graphene-MoS₂ heterostructures..... 1173
 Mater. Today Phys., 16 (2021) Art.No.100324
 S. Hu, S. Ju, C. Shao, J. Guo, B. Xu, M. Ohnishi and J. Shiomi
104. Non-Empirical Law for Nanoscale Atom-by-Atom Wear 1181
 Adv. Sci., 8[2] (2020) Art.No.2002827
 Yang Wang, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi and Momoji Kubo
105. Electronic and magnetic properties of carbide MXenes - the role of electron correlations..... 1187
 Mater. Today Adv., 9 (2021) Art.No.100118
 Soungmin Bae, Yoon-Gu Kang, Mohammad Khazaei, Kaoru Ohno, Yong-Hoon Kim, Myung-Joon Han, Kee Joo Chang and Hannes Raebiger

106. Electron Theory Calculation of Thermodynamic Properties of Steels and Its Application to Theoretical Phase Diagram of the Fe–Mo–B Ternary System 1201
ISIJ Int., 60[12] (2020) pp.2963-2972
M. Enoki, K. Takashashi, S. Mitomi and H. Ohtani
107. Photo-energy conversion efficiency of CH₃NH₃PbI₃/C₆₀ heterojunction perovskite solar cells from first-principles 1211
Mat. Adv., 2 (2021) pp.1665-1675
Khian-Hooi Chew, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno

<2021 年>

1. ミクロな多極子による電子物性の表現論(その 4)…………… 1222
固体物理, 56 (2021) pp.1-19
速水賢、八城愛美、柳有起、楠瀬博明
2. Modulating Interfacial Charge Density of NiP₂-FeP₂ via Coupling with Metallic Cu for Accelerating Alkaline Hydrogen Evolution …………… 1241
ACS Energy Lett., 6[2] (2021) pp.354-363
Ashwani Kumar, Viet Q. Bui, Jinsun Lee, Amol R. Jadhav, Yosep Hwang,
Min Gyu Kim, Yoshiyuki Kawazoe and Hyoyoung Lee
3. Cooperative roles of chemical reactions and mechanical friction in chemical mechanical polishing of gallium nitride assisted by OH radicals: tight-binding quantum chemical molecular dynamics simulations …………… 1251
Phys. Chem. Chem. Phys., 23 (2021) pp.4075-4084
Kentaro Kawaguchi, Yang Wang, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Yuji Higuchi,
Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
4. Catalytic Activity of Gold Clusters Supported on the h-BN/Au(111) Surface for the Hydrogen Evolution Reaction…………… 1262
J. Phys. Chem. C, 125[2] (2021) pp.1334-1344
Min Gao, Maki Nakahara, Andrey Lyalin and Tetsuya Taketsugu
5. An Element-Based Generalized Coordination Number for Predicting the Oxygen Binding Energy on Pt₃M (M = Co, Ni, or Cu) Alloy Nanoparticles…………… 1273
ACS Omega, 6[4] (2021) pp.3218-3226
Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
6. High-pressure synthesis of Ba₂RhO₄, a rhodate analog of the layered perovskite Sr-ruthenate…………… 1282
Phys. Rev. Materials, 5[1] (2021) Art.No.015001-
I. Kurata, José A. Flores-Livas, H. Sugimoto, H. Takahashi, H. Sagayama,
Y. Yamasaki, T. Nomoto, R. Arita and S. Ishiwata

7. Anharmonic effect on the thermally activated migration of $\{10\bar{1}2\}$ twin interfaces in magnesium 1290
Mater. Res. Lett., 9[5] (2021) pp.231-238
Yuji Sato, Thomas Swinburne, Shigenobu Ogata and David Rodney

8. Interplay of Anionic Quasi-Atoms and Interstitial Point Defects in Electrides: Abnormal Interstice Occupation and Colossal Charge State of Point Defects in Dense fcc-Lithium ·· 1298
ACS Appl. Mater. Interfaces, 13[5] (2021) pp.6130-6139
Leilei Zhang, Qiang Wu, Shourui Li, Yi Sun, Xiaozhen Yan, Ying Chen and Hua Y. Geng

9. Nickel-Catalyzed Acyl Group Transfer of o-Alkynylphenol Esters Accompanied by C-O Bond Fission for Synthesis of Benzo[*b*]furan 1308
ChemCatChem, 13[8] (2021) pp.2086-2092
Ryohei Doi, Koji Shimizu, Yuma Ikemoto, Masashi Uchiyama, Mikiko Koshiba, Atsushi Furukawa, Katsumi Maenaka, Satoshi Watanabe and Yoshihiro Sato

10. Theory of polarization-averaged core-level molecular-frame photoelectron angular distributions: I. A full-potential method and its application to dissociating carbon monoxide dication 1315
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 54 (2021) Art.No.024003
Fukiko Ota, Kaoru Yamazaki, Didier Sebilliau, Kiyoshi Ueda and Keisuke Hatada

11. The bonding variation of γ -TiAl during deformation 1327
Phys. Chem. Chem. Phys., 23[6] (2021) pp.3905-3914
Jinkai Wang, Xin Cui, Jianxin Huang, Hao Wang, Zhanpeng Lu, Yanlin He and Ying Chen

12. Study on Ni-Ti alloys around equiatomic composition by the first-principles phase field method 1337
Comp. Mat. Sci., 191 (2021) Art.No.110284
Kaoru Ohno, Monami Tsuchiya, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, Swastibrata Bhattacharyya and Thi Nu Pham

13. Benchmark for *Ab Initio* Prediction of Magnetic Structures Based on Cluster-Multipole Theory 1344
Phys. Rev. X, 11[1] (2021) Art.No.011031
M.-T. Huebsch, T. Nomoto, M.-T. Suzuki and R. Arita
14. Reply to the ‘Comment on “Bi-layering at ionic liquid surfaces: a sum-frequency generation vibrational spectroscopy- and molecular dynamics simulation-based study”’ 1369
Phys. Chem. Chem. Phys., 23 (2021) pp.5028-5030
Takashi Iwahashi, Tatsuya Ishiyama, Yasunari Sakai, Akihiro Morita, Doseok Kim and Yukio Ouchi
15. Detailed Characterization of MoO_x-Modified Rh Metal Particles by Ambient-Pressure XPS and DFT Calculations 1372
J. Phys. Chem. C, 125[8] (2021) pp.4540-4549
Ryo Toyoshima, Jumpei Kawai, Kazuhisa Isegawa, Hiroshi Kondoh, Anchalee Junkaew, Akira Nakayama, Takehiro Asano, Masazumi Tamura, Yoshinao Nakagawa, Mizuho Yabushita and Keiichi Tomishige
16. Recent progress in simulating microscopic ion transport mechanisms at liquid-liquid interfaces 1382
J. Chem. Phys., 154 (2021) Art.No.080901
Akihiro Morita, Ai Koizumi and Tomonori Hirano
17. Uncovering the Role of Counteranions in Ligand Exchange of WSe₂: Tuning the d-Band Center toward Improved Hydrogen Desorption 1391
ACS Appl. Mater. Interfaces, 13[9] (2021) pp.11403-11413
Meeree Kim, G. Hwan Park, Sohyeon Seo, Viet Quoc Bui, Yunhee Cho, Yeseul Hong, Yoshiyuki Kawazoe and Hyoyoung Lee
18. Comprehensive Study on Ni- or Ir-Based Alloy Catalysts in the Hydrogenation of Olefins and Mechanistic Insight 1402
ACS Catal., 11[6] (2021) pp.3293-3309
Jia-qi Bai, Masazumi Tamura, Akira Nakayama, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige

19. Energy relaxation path of excited free OH vibration at an air/water interface revealed by nonequilibrium *ab initio* molecular dynamics simulation 1419
J. Chem. Phys., 154 (2021) Art.No.104708
Tatsuya Ishiyama
20. Comparative Molecular Dynamics Study of the Roles of Anion-Cation and Cation-Cation Correlation in Cation Diffusion in $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ and $\text{LiCB}_{11}\text{H}_{12}$ 1434
Chem. Mater., 33[7] (2021) PP.2357-2369
Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Sangryun Kim, Shigeyuki Takagi and Shin-ichi Orimo
21. Effect of axial molecules and linker length on CO_2 adsorption and selectivity of CAU-8: a combined DFT and GCMC simulation study 1447
RSC Adv., 11 (2021) pp.12460-12469
Diem Thi-Xuan Dang, Hieu Trung Hoang, Tan Le Hoang Doan, Nam Thoai, Yoshiyuki Kawazoe and Duc Nguyen-Manh
22. Phase stability of Au-Li binary systems studied using neural network potential 1457
Phys. Rev. B, 103 (2021) Art.No.094112
Koji Shimizu, Elvis F. Arguelles, Wenwen Li, Yasunobu Ando, Emi Minamitani and Satoshi Watanabe
23. Tuning the Schottky Barrier Height at the Interfaces of Metals and Mixed Conductors ... 1467
ACS Appl. Mater. Interfaces, 13[13] (2021) pp.15746-15754
Kazunori Nishio, Tetsuroh Shirasawa, Koji Shimizu, Naoto Nakamura, Satoshi Watanabe, Ryota Shimizu and Taro Hitosugi

III. 国際会議発表論文

< Proceeding >

1. A First-principles Study on the Strain-induced Localized Electronic Properties of Dumbbell-shape Graphene Nanoribbon for Highly Sensitive Strain Sensors 1476
2020 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD) Proceedings of the SISPAD,16-5 (2020) pp.379-382
Zhang Qinqiang, Ken Suzuki and Hideo Miura
2. Theoretical Study of Heterojunction-Like Electronic Properties Between a Semiconductive Graphene Nanoribbon and a Metallic Graphene for Highly Sensitive Strain Sensors 1480
Proceedings of the ASME 2020, International Mechanical Engineering Congress and Exposition (IMECE2020), IMECE2020-23782 (2020) Art.No.V013T13A005
Qinqiang Zhang, Xiangyu Qiao, Masasuke Kobayashi and Ken Suzuki
3. Exploring Phase Diagram of Unknown Sm-Ti Binary System from First-principles Calculations 1487
Proceedings of the 172c annual meeting, (2020) pp.37-42
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Osamu Takeda, Satoshi Sugimoto and Taichi Abe
4. Magnetic CALPHAD phase diagrams from first-principles 1493
Proceedings of the 172c annual meeting, (2020) pp.43-50
Theresa Davey, Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing and Ying Chen

<2020 年>

1. A First-principles Study on the Strain-induced Localized Electronic Properties of Dumbbell-shape Graphene Nanoribbon for Highly Sensitive Strain Sensors 1501
SISPAD 2020
Online (2020.9.23-6) No.16-5 (Oral)
Zhang Qinqiang, Ken Suzuki and Hideo Miura
2. Beneficial Role of Interstitial Carbon on Corrosion Resistance of Carbon Steels 1502
PRiME 2020
Online (2020.10.4-9) No.C05-1270 (Invited)
M. Kadowaki, A. Saengdeejing, I. Muto, Y. Chen, T. Doi, K. Kawano, Y. Sugawara and N. Hara
3. Room-Temperature Superionic Conduction in Complex Transition Metal Hydrides with High Hydrogen Coordination 1503
The 8th International Conference on Smart Systems Engineering 2020(SmaSys2020)
Yamagata University, Virtual (2020.10.29-30) No.IL1 (Invited)
Shigeyuki Takagi
4. Neural Network Prediction of III-V Compounds 1504
The 6th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment
Jeju, Korea (2020.11.1-4) No.12-3121 (Oral)
Hiroshi Mizuseki, Babu Ram, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Kenta Hongo
5. Effects of Magnetostriction on Domain Wall Dynamics Inside Multi-Grains Soft Magnet Revealed by Micromagnetic Simulations 1505
The 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials(MMM 2020)
Virtual (2020.11.2-6) No.H1-03 (Oral)
H. Tsukahara, H. Imamura and K. Ono
6. Screening of additive elements for development of high-strength copper alloy based on DFT calculations 1506
Recycling Korea 2020 Daejeon
Online (2020.11.12-0) (Oral)
E.-A. Choi, S. Z. Han, J. Ahn and S. H. Lim

7. Theoretical Study of Heterojunction-Like Electronic Properties Between a Semiconductive Graphene Nanoribbon and a Metallic Graphene for Highly Sensitive Strain Sensors 1507
- ASME 2020 International Mechanical Engineering Congress and Exposition (IMECE)
- Online (2020.11.16-19) (Oral)
- Qinqiang Zhang, Xiangyu Qiao, Masasuke Kobayashi and Ken Suzuki

<2021 年>

1. Development of High-Dimensional Neural Network Potentials for InN/AlN heterostructure 1508
International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021(ISWGPDs 2021)
Online (zoom) (2021.1.19-21) No.Poster 3 (Poster)
Ying Dou, Koji Shimizu, Hiroshi Fujioka and Satoshi Watanabe
2. Prediction of microstructures of alloys by the first-principles phase field method without thermodynamic empirical parameter 1509
Vebleo, Webinar on Science, Engineering and Technology
Online (2021.1.23-0) (Keynote Talk)
Kaoru Ohno
3. Is Materials Informatics Useful to Predict New Materials?..... 1510
ICONN2021
Tamil Nadu - India (2021.2.1-3) (Invited)
Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno, Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Kenta Hongo, Takeshi Nanri and Nobuhiko Sarukura
4. Data-driven approach for accelerated computing – a CFD example and beyond 1511
International Workshop on Machine Learning for Soft Matter 2021(MLSM2021)
Online Webiner (2021.2.9-10) (Invited)
Hayato Shiba, Kengo Nakajima and Takashi Shimokawabe
5. Tolerance behavior of the first-principles phase field method..... 1512
The 21st International Union of Materials Research Societies – International Conference in Asia(IUMRS-ICA2020)
Chiang Mai, Thailand (Online) (2021.2.23-26) No.Session F1 (Keynote Talk)
Kaoru Ohno
6. Theoretical study on functional defects and dopants in carbon-based nanomaterials 1513
The 21st International Union of Materials Research Societies – International Conference in Asia(IUMRS-ICA2020)
Chiang Mai, Thailand (Online) (2021.2.23-26) No.49 (Invited)
Rodion V. Belosludov

7. Non-isothermal well-entangled polymer melt flow between two coaxial cylinders — a multiscale simulation approach — 1514
 The 21st International Union of Materials Research Societies – International Conference in Asia(IUMRS-ICA2020)
 Chiang Mai, Thailand (Online) (2021.2.23-26) No.R1_O19 (Oral)
 Yuji Hamada, Takeshi Sato and Takashi Taniguchi

8. Stability and phase transition of cristobalite in SiO₂ 1515
 TMS 2021 Virtual Annual Meeting & Exhibition (TMS2021 Virtual)
 Virtual (2021.3.15-18) (Oral)
 Ying Chen, Nguyen-Dung Tran, Satoshi Kitaoka and Tetsuo Mohri

9. Thermodynamic Stability of the light elements doping in Sm(Fe, Co)₁₂ compounds ··· 1516
 TMS 2021 Virtual Annual Meeting & Exhibition (TMS2021 Virtual)
 Virtual (2021.3.15-18) (Oral)
 A. Saengdeejing and Y. Chen

10. Computation of thermodynamics and stability of FeNiCoCrMn/Pd high entropy alloys: competition between equiatomic and non-equiatomic 1517
 TMS 2021 Virtual Annual Meeting & Exhibition (TMS2021 Virtual)
 Virtual (2021.3.15-18) (Poster)
 Dung Tran and Ying Chen

11. Electronic properties of periodically modified graphene: A first-principles study···· 1518
 APS March Meeting 2021
 Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.A56.00008 (Oral)
 Y. Taguchi and S. Saito

12. Changes in the number of doctoral degree holders in computational materials science in Japan -recent diversity of research fields-..... 1519
 APS March Meeting 2021
 Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.C15.00011 (Oral)
 Yayoi Terada and Tetsuo Mohri

13. Functional Renormalization Group Study of Correlated Bose-Einstein Systems—Low-Temperature Properties of Specific Heat 1520
APS March Meeting 2021
Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.C44.00012 (Oral)
Akimitsu Kirikoshi and Takafumi Kita

14. Modulation doping of hexagonal boron nitride trilayers 1521
APS March Meeting 2021
Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.E57.00009 (Oral)
T. Haga, Y. Matsuura, Y. Fujimoto and S. Saito

15. Quantitative evaluation of thermoelectric characteristics of small-molecule organic semiconductors based on electronic structure calculations 1522
APS March Meeting 2021
Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.M59.00006 (Oral)
Masahiro Ohno, Koji Shimizu and Satoshi Watanabe

16. *Ab initio* prediction of noncollinear, uniform magnetic structures 1523
APS March Meeting 2021
Central Daylight Time, USA, Virtual (2021.3.15-19) No.X37.00005 (Oral)
Marie-Therese Huebsch, Takuya Nomoto, Michi-To Suzuki and Ryotaro Arita

IV. 紀要

<2020 年>

1. ハイエントロピー合金の形成要因の自由エネルギーによる検討…………… 1524
科学研究費補助金・新学術領域研究
ハイエントロピー合金：元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学
理
令和2年度報告
東北大学多元物質科学研究所 榎木勝徳、大谷博司

V. 予稿集

<2020 年>

1. クラスタ複合体の生成量向上のための装置改良—より効率的な分光測定をめざして…………… 1527
ナノ学会第 18 回大会
横浜 (現地開催中止) (2020.5.27-29) No.P79 (Poster)
山崎祐哉、尾高英穂、市橋正彦
2. 計算材料科学におけるデータ科学とマルチスケール・シミュレーション …… 1528
第 7 回東北大学知のフォーラム 実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー「計算材料科学&マテリアルズ・インフォマティクス入門」
オンライン開催 (2020.9.7) (Invited)
川勝年洋
3. クラスレート化合物の熱電変換特性制御…………… 1530
第 81 回応用物理学会秋季学術講演会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.8p-Z09-15 (Oral)
大西正人、山本貴博、藤村幸司、清水裕、山本潔、塩見淳一郎
4. 二次元の各種ブラベ格子の周期で構造修飾されたグラフェンの電子構造 …… 1531
第 81 回応用物理学会秋季学術講演会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.9p-Z29-13 (Oral)
伊藤智哉、斎藤晋
5. 第一原理計算による WO_3 ナノワイヤの電気伝導と超伝導の検討…………… 1532
第 81 回応用物理学会秋季学術講演会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.11a-Z26-5 (Oral)
関川卓也、長島一樹、Guozhu Zhang、広瀬雄介、摂待力生、柳田剛、大野義章
6. Sn ペロブスカイトの Sn 欠損に A サイトイオンが及ぼす影響…………… 1533
第 81 回応用物理学会秋季学術講演会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.11p-Z11-10 (Oral)
飯久保智、奥村太一、奥村峻、早瀬修二

7. 有効 196 軌道模型に基づく $\text{PrT}_2\text{Al}_{20}$ ($T=\text{Ti, V}$) の多極子揺らぎと超伝導 … 1534
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.8aH3-8 (Oral)
飯塚優人、山田武見、半澤克郎、大野義章
8. 第一原理計算による Al-Zn-Mg 近似結晶の電子状態と輸送係数 …………… 1535
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.9pF2-2 (Oral)
齋藤雅樹、関川卓也、大野義章
9. 多角形の構造欠陥を周期的に導入したグラフェンの電子物性 …………… 1536
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.9pG1-1 (Oral)
田口裕太、齋藤晋
10. Hybrid 汎関数を用いた h-BN 原子膜における不純物状態の研究 …………… 1537
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.9pG1-8 (Oral)
芳賀太史、Shuaishuai Yuan、Kirk H. Bevan、齋藤晋
11. ニューラルネットワークポテンシャルによる金-リチウム合金系の解析 …… 1538
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.10pJ1-4 (Oral)
清水康司、Elvis F. Arguelles、李文文、安藤康伸、南谷英美、渡邊聡
12. 電子構造計算を用いた低分子有機半導体の熱電特性の定量評価 …………… 1539
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.PSG-15 (Poster)
大野雅央、清水康司、渡邊聡
13. 第一原理計算に基づく SmS の反強磁性相における電子状態 …………… 1540
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.PSH-3 (Poster)
関川卓也、大野義章

14. 第一原理計算に基づく WTe₂ の巨大磁気抵抗効果 1541
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.PSH-78 (Poster)
長谷川巧、関川卓也、中村康晴、大野義章
15. 動的平均場理論によるハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率 .. 1542
日本物理学会 2020 年秋季大会
オンライン開催 (2020.9.8-11) No.PSH-79 (Poster)
猪熊祐輔、山田武見、大野義章
16. 分子構造変化の高時間分解追跡に向けた偏光方向平均分子座標系光電子角度分布の Full-potential 多重散乱理論による研究 1543
第 23 回 EXAFS 討論会
オンライン開催 (2020.9.9-11) No.O1-10 (Oral)
太田蒔子、Didier Sébilleau、山崎馨、上田潔、畑田圭介
17. First-principles analysis of dominant structural factors on the strain dependence of the electronic density state of dumbbell shape graphene nanoribbon 1545
日本機械学会 2020 年度年次大会
オンライン開催 (2020.9.13-16) No.J03204 (Oral)
Qinqiang Zhang, Xiangyu Qiao, Ken Suzuki and Hideo Miura
18. 電子共鳴によるキラル SFG のバルク・界面成分の理論解析 1549
分子科学会オンライン討論会
オンライン開催 (2020.9.14-17) No.3D07 (Oral)
細谷毅、王琳、森田明弘
19. 極低温コバルトクラスター複合体の生成機構の解明 1551
分子科学会オンライン討論会
オンライン開催 (2020.9.14-17) No.4B09 (Oral)
山崎祐哉、尾高英穂、市橋正彦
20. Cantor 合金における短範囲規則化傾向と機械的特性との関係 1553
日本金属学会 2020 年秋期 (第 167 回) 講演大会
オンライン開催 (2020.9.15-18) No.S3.23 (Oral)
榎木勝徳、大谷博司

21. 日本の計算物質科学の博士号取得者数の近年の推移に対する考察—博士号の専攻分野の多様性と計算物質科学分野の博士号取得者— …… 1554
日本金属学会 2020 年秋期 (第 167 回) 講演大会
オンライン開催(2020.9.15-18) No.20 (Oral)
寺田弥生、毛利哲夫
22. 電子論計算に基づく理論状態図の構築 …… 1555
日本金属学会 2020 年秋期 (第 167 回) 講演大会
オンライン開催 (2020.9.15-18) No.60 (Oral)
大谷博司、榎木勝徳
23. 第一原理計算を用いた粒界弾性率の評価 …… 1556
日本金属学会 2020 年秋期 (第 167 回) 講演大会
オンライン開催(2020.9.15-18) No.306 (Oral)
白坂仁、上村宗二郎、連川貞弘
24. 元素ごとの一般化配位数による白金スキン触媒ナノ粒子への酸素束縛エネルギーの記述 …… 1557
第 126 回触媒討論会
オンライン開催 (2020.9.16-18) No.1G04 (Oral)
難波優輔、古山通久
25. 次世代エネルギー技術への計算化学の応用 …… 1558
第 126 回触媒討論会
オンライン開催 (2020.9.16-18) No.1H11 (Oral)
古山通久
26. Electronic properties of graphene with structural defects arranged periodically … 1559
第 59 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
オンライン開催 (2020.9.16-18) No.2-1 (Oral)
Yuta Taguchi and Susumu Saito
27. 分子性半導体の結晶構造制御の試み …… 1560
第 69 回高分子討論会
オンライン開催 (2020.9.16-18) No.1N06 (Oral)
瀧宮和男、川畑公輔、大垣卓也

28. アクリレート系高分子と水の相互作用に関するバルク，および界面の分子動力
学シミュレーション研究…………… 1562
第 69 回高分子討論会
オンライン開催 (2020.9.16-18) No.2J05 (Oral)
石山達也
29. Computational screening of efficient additive elements to stabilize the interface between
Cu matrix and Ni₂Si precipitates in Cu-Ni-Si alloys …………… 1564
日本銅学会第 60 回講演大会
オンライン開催 (2020.10.24-25) (Oral)
Eun Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi, Jehyun Lee and
Sung Hwan Lim
30. ニューラルネットワークポテンシャルによる金-リチウム界面における合金
化過程の解析…………… 1566
2020 年日本表面真空学会学術講演会
オンライン開催 (2020.11.17-21) No.2Ca02 (Oral)
清水康司、Elvis F. Arguelles、李文文、安藤康伸、南谷英美、渡邊聡
31. First-principles Study of Thermodynamic Stability in Multi-elements Alloying
(Sm,X)(Fe,Y)₁₂Z Compounds…………… 1567
第 44 回日本磁気学会学術講演会
オンライン開催 (2020.12.14-17) No.16aA-4 (Oral)
Saengdeejing Arkapol and Chen Ying
32. カーボンナノチューブに閉じ込めた水分子の振動解析…………… 1568
第 34 回分子シミュレーション討論会
オンライン開催 (2020.12.15) No.120P (Poster)
三浦俊次、平塚将起、山本詠士、石山達也、泰岡顕治
33. 粗視化分子動力学法を用いた環状鎖・線状鎖混合系のレオロジー解析 …… 1569
第 34 回分子シミュレーション討論会
オンライン開催 (2020.12.15) No.134P (Poster)
村島隆浩

34. 水/氷界面における非対称性水素結合構造 1570
第 34 回分子シミュレーション討論会
オンライン開催 (2020.12.15) No.316P (Poster)
北中一也、石山達也

<2021 年>

1. 光化学反応の量子化学：可視・紫外領域から X 線領域への拡張 …………… 1571
計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質
科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2020
オンライン開催 (2021.2.15-16) (Oral)
山崎馨

2. First-principles study of impurity states induced by a carbon or oxygen atom in h-BN
monolayer …………… 1572
第 60 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
オンライン開催 (2021.3.1-3) No.2P-5 (Poster)
Taishi Haga, Shuaishuai Yuan, Kirk H. Bevan and Susumu Saito

3. Tuning electronic properties of graphene antidot lattices with truncated triangular holes:
A First-principles study …………… 1573
第 60 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
オンライン開催 (2021.3.1-3) No.3P-7 (Poster)
Yuta Taguchi and Susumu Saito

4. 磁気対称性の破れとトポロジーが生み出す巨大輸送現象の研究 …………… 1574
スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点 2020 年度 (令和 2
年度) 年次報告会
オンライン、慶應義塾大学 CSRN (2021.3.9) No.O-8 (Oral)
鈴木通人

5. 極低温クラスター複合体の生成機構：コバルトクラスターとヘリウムクラスター
との衝突合体 …………… 1575
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.12aA1-4 (Oral)
尾高英穂、山崎祐哉、市橋正彦

6. 複雑流体中におけるカルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション
…………… 1576
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.12aL3-11 (Oral)
浅野優太、渡辺宙志、野口博司

7. 冷却極性分子系での Kitaev 量子スピン液体の実現について：汎関数繰り込み群による研究…………… 1577
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.13aH2-1 (Oral)
福井毅勇、加藤康之、那須讓治、求幸年
8. 磁性体中における多極子の分類論…………… 1578
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.13aH2-6 (Oral)
八城愛美、楠瀬博明、速水賢
9. 磁気四極子秩序下における隠れたスピン-軌道結合…………… 1579
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.13aH2-7 (Oral)
速水賢、楠瀬博明
10. 非線形電気伝導テンソルにおける主要モデルパラメータ抽出手法の提案 …… 1580
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.13aH2-10 (Oral)
大岩陸人、楠瀬博明
11. 第一原理計算に基づく超伝導体 $AxWO_3$ の表面及びナノワイヤの電子状態 …… 1581
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.14aH2-3 (Oral)
関川卓也、川井弘之、長島一樹、柳田剛、大野義章
12. 鉄系超伝導体における電子相関とフォノンの協力による超伝導機構…………… 1582
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.14aH2-4 (Oral)
山川洋一、大成誠一郎、紺谷浩
13. 動的平均場理論によるハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率 II …… 1583
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.14aH2-6 (Oral)
猪熊祐輔、大野義章

14. 周期的アンダーソン模型における価数転移と励起子秩序—SmS における可能性…………… 1584
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.PSH-30 (poster)
高野真一、今野元、関川卓也、大野義章
15. 第一原理計算による Na_xWO_3 系の超伝導転移温度…………… 1585
日本物理学会第 76 回年次大会
オンライン開催 (2021.3.12-15) No.PSH-65 (poster)
佐野和博、関川卓也、大野義章
16. 第一原理計算による WO_3 ナノワイヤの電気伝導と超伝導の検討 II…………… 1586
第 68 回応用物理学会春季学術講演会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.17p-Z18-13 (Oral)
関川卓也、長島一樹、Guozhu Zhang、柳田剛、大野義章
17. ハイエントロピー合金の安定性と熱力学特性の第一原理計算 : CrFeNiCoMn と CrFeNiCoPd の場合…………… 1587
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.S4.1 (基調講演)
陳迎、Tran Nguyen-Dung、Arkapol Saengdeejing
18. Novel quinary single-phase face-centered cubic high-entropy alloys with enhanced lattice distortion, planar slip, and twinning-induced plasticity…………… 1588
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.S4.17 (公募シンポジウム講演)
J. Li, K. Yamanaka, H. Bian, K. Aoyagi and A. Chiba
19. Phase Diagram of Sm-Ti Binary System from First-principles Calculations…………… 1589
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.S1.25 (Oral)
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Osamu Takeda, Satoshi Sugimoto and Taichi Abe

20. 第一原理計算を用いた炭素鋼の腐食メカニズムの解明 …………… 1590
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.S5.17 (Oral)
門脇万里子、Arkapol Saengdeejing、武藤泉、陳迎、土井教史、河野佳織、
菅原優、原信義
21. 計算物質科学の博士号取得者数の近年の推移—国内大学および海外大学の比
較：カルフォルニア工科大学の事例を中心に— …………… 1591
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.59 (Oral)
寺田弥生、毛利哲夫
22. Cu-Au 系の原子サイズに関する理論的考察 …………… 1592
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.276 (Oral)
陳迎、堀内寿晃、毛利哲夫
23. $\text{Li}_5\text{MoH}_{11}$ における錯イオンの擬回転とリチウムイオン輸送 …………… 1593
日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会
オンライン開催 (2021.3.16-19) No.295 (Oral)
高木成幸、折茂慎一
24. 計算材料科学による耐熱材料の理論設計 …………… 1594
日本鉄鋼協会第 181 回春季講演大会
オンライン開催 (2021.3.17-19) No.195 (西山記念賞受賞講演)
佐原亮二
25. 実在系第一原理計算に基づく多元素ナノ合金の安定性と触媒特性の予測 …… 1595
日本化学会 第 101 春季年会 (2021)
オンライン開催 (2021.3.19-22) No.S04-4pm-07 (依頼講演)
古山通久
26. Donor-acceptor-type organic semiconductors based on
acenedichalcogenophenediones …………… 1597
日本化学会 第 101 春季年会 (2021)
オンライン開催 (2021.3.19-22) No.A03-1pm-05 (Oral)
川畑公輔、瀧宮和男

27. β 位にメチルカルコゲノ基を有するテトラチエノアセン誘導体の結晶構造と分子間相互作用 1598
日本化学会 第 101 春季年会 (2021)
オンライン開催 (2021.3.19-22) No.A08-1pm-12 (Oral)
金澤輝石、川畑公輔、瀧宮和男
28. オリゴエチレンオキシド鎖を有する 2,7-ジフェニル[1]ベンゾチエノ[3,2-*b*][1]ベンゾチオフェン誘導体の薄膜構造と電荷輸送特性 1599
日本化学会 第 101 春季年会 (2021)
オンライン開催 (2021.3.19-22) No.A20-4pm-04 (Oral)
今井太一、川畑公輔、瀧宮和男
29. 元素ごとの一般化配位数による合金ナノ粒子への吸着エネルギーの記述... 1600
日本化学会 第 101 春季年会 (2021)
オンライン開催 (2021.3.19-22) No.A26-3pm-07 (Oral)
難波優輔、古山通久
30. 第一原理計算と教師あり学習を用いた白金スキン触媒ナノ粒子への酸素吸着特性の解析 1601
電気化学会第 88 回大会
オンライン開催 (2021.3.22-24) No.3K05 (Oral)
難波優輔、古山通久

VI. 新聞記事

<2020 年>

1. 東北大、精密な微小機械システムにおいて材料の摩耗量を予測できる理論式を提案
日本経済新聞電子版 (2020.12.8)
2. 精密な微小機械システムの材料の摩耗量予測式を提案 —スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果—
東北大学プレスリリース (2020.12.8)
3. 東北大、微小機械システムの摩耗量予測式提案に成功
航空新聞社 WING 電子版 (2020.12.9)
4. 数十 nm 領域の摩耗量予測式を提案、微小機械の長寿命化に期待
日経クロステック電子版 (2020.12.14)
5. 東北大、スパコンで微小機械システム材料の摩耗予測式
日刊工業新聞 (2020.12.22)

VII. 学位取得

<博士>

1. 三酸化モリブデンフラックス蒸発法によるルビー結晶のエピタキシャル成長に関する研究
信州大学大学院総合医理工学研究科総合理工学専攻物質創成科学分野
鮎沢俊輔
2. 第一原理分子動力学と光電子分光測定を用いた流体水銀の電子状態転移と長周期構造を持つ結晶中不純物クラスターに関する研究
新潟大学大学院自然科学研究科数理物質科学専攻化学コース
小林健太郎
3. Functional Renormalization Group Study on Kitaev Quantum Spin Liquid
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻
福井毅勇
4. Atomistic modeling and simulation of nucleation in materials
大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻機能デザイン領域
佐藤悠治
5. Mo 添加 CoCrFeNi 基 FCC 単相高エントロピー合金の力学特性に関する実験的および理論的研究
東北大学大学院工学研究科材料システム工学専攻
李家翔
6. 配向薄膜の異方的熱伝導の評価と制御性の解明
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
山口信義
7. 熱輻射応用のための波長選択的フォトニック構造の最適デザイン
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
Jiang Guo

<修士>

1. 遷移金属-酸素多面体骨格の多様化による二次電池電極材料設計
信州大学大学院総合理工学研究科工学専攻物質化学分野
原健治朗
2. 機械学習ポテンシャルによる炭素系材料の熱伝導特性の解析
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻
西野光紀
3. III族窒化物半導体デバイス構造の理論的解析
東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻
Dou Ying
4. 動的平均場理論によるハバード模型のスピン-重項と三重項の超伝導感受率
新潟大学大学院自然科学研究科数理物質科学専攻物理学コース
猪熊祐輔
5. Ta_2NiSe_5 の励起子相におけるドーピング効果の理論
新潟大学大学院自然科学研究科数理物質科学専攻物理学コース
今野元
6. 超伝導準結晶 Al-Zn-Mg の近似結晶に対する第一原理計算-電子状態の組成比・近似度依存性-
新潟大学大学院自然科学研究科数理物質科学専攻物理学コース
齋藤雅樹
7. 単層 NbSe_2 の超伝導ペアに関する考察
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
平泉達哉
8. クラスター磁性体 $\text{Na}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x)_3\text{Ge}_4\text{O}_{12}$ の元素置換効果
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
村田大樹

9. クラスター多極子を用いた交差相関応答と量子ドットへの応用
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
本橋直也
10. 2位置換ジナフトチエノチオフェンの構造と物性
東北大学大学院理学研究科化学専攻
臼井沙耶香
11. 光学活性な 2-エチルヘキシル基を導入した有機半導体分子の物性
東北大学大学院理学研究科化学専攻
住友健太
12. キノイド化合物の物性制御を目指した新規終端基の開発研究
東北大学大学院理学研究科化学専攻
竹中宏幸
13. ピラニリデン構造を基盤とする新規 n 型有機ドーパントの開発と熱電材料への応用
東北大学大学院理学研究科化学専攻
松尾崇也
14. チオフェン縮環サブポルフィラジンの合成と物性評価
東北大学大学院理学研究科化学専攻
渡邊大地
15. 電子論計算による Cu-Ni-Si 三元系状態図の構成
東北大学大学院工学研究科智能デバイス材料学専攻
山田瑞樹
16. β 型チタン合金における ω 変態の制御とその応用
東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻
阿部亮太
17. カチオン挿入・脱離による α - MnO_2 の熱伝導率制御
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
森敬太

18. FCC型ハイエントロピー合金の応力腐食割れプロセスの反応力場分子動力学シミュレーション
東北大学大学院工学研究科知能デバイス材料学専攻
劉暢
19. ケイ素系セラミックスにおける潤滑膜の生成と自己修復に関する反応分子動力学シミュレーション
東北大学大学院工学研究科知能デバイス材料学専攻
川浦正之
20. 反応分子動力学法によるアルミニウム/鉄界面の摩擦シミュレーションと低摩擦化に向けた凝着・移着抑制メカニズムの解明
東北大学大学院工学研究科知能デバイス材料学専攻
佐藤雄基
21. グラフ構造と転移学習を用いた熱伝導率予測モデルの開発
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
新田涼介
22. 非弾性フォノン輸送解析手法の開発
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
濱川登夢

VIII. 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…………… 1602
2. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 1603
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図…………… 1604