

2021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

(2021年4月～2022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

<2021年>

1. 高圧下水素化合物高温超伝導体の理論研究 1
東京大学工学系研究科物理工学専攻 有田亮太郎
2. Molecular dynamics simulation of ionic conduction in solids 3
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 (AIMR), Tohoku University Shigeyuki Takagi
3. 有機導体・半導体の電子構造解析 7
東北大学大学院理学研究科 瀧宮和男、川畑公輔
4. General-purpose neural network interatomic potential for the α -iron and hydrogen binary system: Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement 12
大阪大学 尾方成信

5. Studies on the Correlation between Structures, Properties and Reactivity of Cluster Complexes	14
豊田工業大学 市橋正彦、安松久登	
九州大学大学院理学研究科 寺寄亨	
東北大学金属材料研究所 Rodion Belosludov	
6. 高分子と金属材料の接着に関するマルチスケールシミュレーション技法の構築	16
防衛大学校応用物理学科 萩田克美	
東北大学多元物質科学研究所 宮田智衆、陣内浩司	
東北大学理学研究科 村島隆浩	
東北大学理学研究科・金属材料研究所 川勝年洋	
7. 軟磁性材料でのエネルギー損失における磁歪効果の解明	21
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	
8. In/Si(111)表面上の金属フタロシアニン分子膜	26
京都大学理学研究科化学専攻 有賀哲也	
9. 結晶粒子形状制御のための表面安定性解析	28
信州大学先鋭材料研究所 椎葉寛将、手嶋勝弥	
10. 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	31
立教大学理学部 望月祐志、奥脇弘次	
11. 実空間計算手法を用いた複雑磁気構造系の輸送特性の研究	36
東京大学大学院工学系研究科 野本拓也	
12. トポロジカル系における新奇量子相とダイナミクス	37
東京大学大学院理学系研究科 藤堂眞治、諏訪秀麿、沓澤太斗	
13. 多元素ナノ合金創製のための大規模安定性データの創出	40
信州大学先鋭材料研究所 古山通久	
14. 第一原理分子動力学法を用いた固体酸化物触媒の機能解明	42
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	

15. 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 …………… 46
九州大学応用力学研究所 徳永和俊
16. 磁性材料が示す非対角応答現象の解析手法の開発 …………… 48
明治大学理工学部 楠瀬博明、大岩陸人
17. 高分子溶融体流動のマルチスケールシミュレーション …………… 50
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
18. くりこみ群に基づく有限温度 BEC 相の解析-超流動 ^4He 相への適用…………… 55
北海道大学 北孝文
19. 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 …………… 59
新潟大学理学部 大野義章
新潟大学自然科学研究科 関川卓也、飯塚優人、小林健太郎、猪熊祐輔、
長谷川巧、伊海田陸、王宇、川井弘之
20. Enhancing Thermoelectric Properties of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ Perovskite via High Pressure and Strain…………… 62
Kyushu University Q. Wang and S. Iikubo
Kyushu Institute of Technology Y. Tang and Z. Horita
21. A study on oxidation initiation mechanism of hydrogen containing alloy surfaces …… 63
National Institute of Technology, Sendai College, Natori Campus Nishith K. Das
22. 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 …………… 66
東京大学工学系研究科 清水康司、渡邊聡
23. 電気多極子秩序状態などの電子状態と NQR 周波数の研究 …………… 68
神戸大学理学研究科 播磨尚朝
24. 低温における酸素移動が生じる金属酸化物の第一原理計算 …………… 69
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

25. First-principles investigation of $B_xGa_{1-x}N$ structural configurations 73
 Institute of Laser Engineering, Osaka University Jessiel Siaron Gueriba,
 Melvin John Fernandez Empizo, Kohei Yamanoi and Nobuhiko Sarukura
 Korea Institute of Science and Technology (KIST) Hiroshi Mizuseki
 New Industry Creation Hatchery Center • SRM Institute of Science and Technology,
 Tohoku University • Suranaree University of Technology Yoshiyuki Kawazoe
 Computer, Electrical and Mathematical Sciences and Engineering Division, King
 Abdullah University of Science and Technology Kazuhiro Ohkawa
26. 水和イオン含有チアミン結晶の低振動吸収スペクトルの第一原理計算 77
 東北大学大学院農学研究科 高橋まさえ
27. 分子シミュレーションによる有機無機界面の親和性評価 80
 東北大学工学研究科 塚田隆夫、久保正樹、斎藤高雅、竹林遼
 東北大学金属材料研究所 久保百司
28. 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 82
 東北大学大学院理学研究科 森田明弘、小泉愛、伊藤大晟
 富山大学理工学研究部 石山達也
29. 第一原理ハイスループット計算に基づく物質設計 85
 東北大学大学院理学研究科 是常隆
30. 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 87
 東北大学大学院理学研究科・金属材料研究所 川勝年洋
 東北大学大学院理学研究科 村島隆浩、森井洋平
31. 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 92
 東北大学多元物質科学研究所 榎木勝徳
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 94
 東北大学大学院工学研究科 宍戸博紀
33. 蓄電池・蓄熱に向けた酸化物材料の開発 96
 東北大学金属材料研究所 李弘毅、畠山拓也、岡本範彦、市坪哲

34. 酸化物核燃料のニューラルネットワークポテンシャルの開発 97
東北大学金属材料研究所 小無健司、松尾悟
35. First-principles Monte Carlo simulation of Suzuki segregation in a quinary concentrated solid-solution alloy 99
Institute for Materials Research, Tohoku University Jiaxiang Li, Kenta Yamanaka and Akihiko Chiba
36. 電子ビーム積層造形におけるファイヤーワークス現象の研究 102
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 104
Gwangju Institute of Science and Technology (GIST) 金相侖
東北大学金属材料研究所 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 106
東北大学金属材料研究所 高木成幸
39. 第一原理計算を用いた磁歪定数の符号に及ぼすスピン-軌道相互作用の影響の解明 109
東北大学金属材料研究所 梅津理恵
40. 材料複合系の機能発現・劣化・破壊メカニズムの大規模分子動力学シミュレーション解析 113
東北大学金属材料研究所 尾澤伸樹、大谷優介、許競翔、陳茜、高橋昭、中村美穂、小沼早紀、渡辺瑛奈子、星野有紀、上原周一、張静、蘇怡心、劉仲民、川浦正之、小野寺建人、矢鳴晃人、谷合凌輔、清水界斗、渡部祥、大槻陸、中村哲也、横井瑞穂、趙コウヨ、浅野優太、久保百司
41. 反強磁性体の磁気構造とトポロジーの解析に基づく輸送現象の研究 118
東北大学金属材料研究所 鈴木通人

46. High-precision free energy calculation and full first-principles phase diagram·····133
 Tohoku University Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Nguyen-Dung Tran,
 Theresa Davey, Qinqiang Zhang and Zihao Wang
 National Institute for Materials Science (NIMS) Mariko Kadowaki
 Beijing University of Science and Technology Lei Wang
 Shanghai University Hao Wang
 Institute of Fluid Physics Hua Y. Gneg
 NIMTE, Chinese Academy of Sciences Hubin Luo
 Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences Ivan Štich and Jan Brndiar
47. 第一原理シミュレーション計算による有機金属構造体マテリアルズインフォマ
 ティックス·····138
 東北大学大学院医工学研究科 松木英敏
48. Aperiodic van der Waals heterostructures with minimum thermal conductivity·····143
 Department of Physics, Yunnan University Shiqian Hu
 Department of Mechanical Engineering, the University of Tokyo Wenyang Din
 and Junichiro Shiomi
49. 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·····145
 東北大学金属材料研究所 佐藤浩樹
50. 任意の電子励起固有状態に適用可能な TOMBO の開発・普及·····149
 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
51. 単層 CNT の構造制御合成に向けた分子動力学シミュレーション·····153
 東京大学機械工学専攻 小幡郁真、丸山茂夫
52. 水酸アパタイトの摩耗素過程の分子動力学解析·····155
 長岡技術科学大学 Pham Ding Dat and Yuichi Otsuka

53. COHERENT DIFFRACTION IMAGING OF NANO MATERIALS BY A TABLE-TOP XUV SOURCE 157
 Attosecond Science Research Team, RIKEN Center for Advanced Photonics
 Giang Tran and Katsumi Midorikawa
54. Exciton trapping in low-dimensional perovskites 162
 Yokohama National University, Department of Physics Hannes Raebiger and
 Soungmin Ba
55. バナジウム系水素化物における水素吸蔵放出特性のサイクル劣化機構 164
 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 池田一貴
56. 放射性同位元素アクチニウムの計算科学的手法による錯体構造解析及び安定度
 評価 166
 東北大学金属材料研究所 白崎謙次
 東京工業大学科学技術創成研究院 中瀬正彦
57. Theoretical design of novel sustainable catalytic materials 168
 Faculty of Science, Hokkaido University A. Lyalin, S. Kumar, T. Iwasa and
 T. Taketsugu
58. ナノ・バイオ分子におけるX線誘起解離動力学の実時間イメージング理論 171
 理化学研究所光量子工学研究センター 山崎馨
59. 第一原理電子状態計算による化学反応過程の研究 173
 大阪大学大学院工学研究科 Van An Dinh、Thanh Ngoc Pham、
 Yuelin Wang、Harry Handoko Halim、John Isaac Enriquez、
 Beatriz Andrea Choi Tan、濱本雄治、濱田幾太郎、森川良忠
60. 深層学習を用いた Wannier 関数自動生成器の作成 174
 東京大学物性研究所 吉見一慶
61. データ駆動加速アルゴリズムによる長時間分子動力学現象の解明 177
 東京大学情報基盤センター 芝隼人

62. 半導体プロセスにおける表面反応の分子動力学シミュレーションの検証 ……	180
株式会社日立製作所 北川功、栗原優	

II. 原著論文

<2021 年>

1. Effect of the synthesis conditions of $\text{Ce}_{0.9}\text{Gd}_{0.1}\text{O}_{1.95}$ powder on its morphology and characteristics of the oxygen ion-conducting ceramics obtained by spark plasma sintering 185
Ceram. Int., 47[2] (2021) pp.2557-2564
D.V. Maslennikov, A.A. Matvienko, A.A. Sidelnikov, D.V. Dudina, M.A. Esikov, R.V. Belosludov and H. Kato
2. Charge transfer driven interaction of CH_4 , CO_2 and NH_3 with TiS_2 monolayer: Influence of vacancy defect 193
Catal. Today, 370 (2021) pp.189-195
Tisita Das, Sudip Chakraborty, Rajeev Ahuja, Yoshiyuki Kawazoe and Gour P. Das
3. Electronic and magnetic properties of carbide MXenes - the role of electron correlations 200
Mater. Today Adv., 9 (2021) Art.No.100118
S. Bae, Y.-G. Kang, M. Khazaei, K. Ohno, Y.-H. Kim, M.J. Han, K.J. Chang and H. Raebiger
4. Photo-energy conversion efficiency of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{C}_{60}$ heterojunction perovskite solar cells from first-principles 214
Mater. Adv., 2[5] (2021) pp.1665-1675
Khian-Hooi Chew, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
5. Pentagonal transition-metal (group X) chalcogenide monolayers: Intrinsic semiconductors for photocatalysis 225
Int. J. Hydrogen Energy, 46[14] (2021) pp.9371-9379
Yuanju Qu, Chi Tat Kwok, Yangfan Shao, Xingqiang Shi, Yoshiyuki Kawazoe and Hui Pan
6. First-principles study of a topological phase transition induced by image potential states in MXenes 234
Phys. Rev. B, 103[3] (2021) Art.No.035433
Mengying Wang, Mohammad Khazaei, Yoshiyuki Kawazoe and Yunye Liang

7. Study on Ni-Ti alloys around equiatomic composition by the first-principles phase field method 244
 Comput. Mater. Sci., 191 (2021) Art.No.110284
 Kaoru Ohno, Monami Tsuchiya, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara,
 Swastibrata Bhattacharyya and Thi Nu Pham

8. Recent progress in simulating microscopic ion transport mechanisms at liquid-liquid interfaces 251
 J. Chem. Phys., 154[8] (2021) Art.No.080901
 Akihiro Morita, Ai Koizumi and Tomonori Hirano

9. Interlayer coupling effect on skyrmion dynamics in synthetic antiferromagnets 260
 Appl. Phys. Lett., 118 (2021) Art.No.082403
 Lei Qiu, Laichuan Shen, Xichao Zhang, Yan Zhou, Guoping Zhao, Weixing Xia,
 Hu-Bin Luo and J. Ping Liu

10. Temperature-Dependent Low-Frequency Vibrations of Thiamine Crystal Containing Hydrated Ions 266
 J. Phys. Chem. A, 125[9] (2021) pp.1837-1844
 Masae Takahashi, Mitsuru Kowada, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and
 Yuka Ikemoto

11. Accurate Prediction of the Excited States in the Fully Conjugated Porphyrin Tapes across the Full Spectral Range: A Story of the Interplay between π - π^* and Intramolecular Charge-Transfer Transitions in Soft Chromophores 274
 J. Phys. Chem. A, 125[12] (2021) pp.2480-2491
 Rodion V. Belosludov, Dustin E. Nevenon and Victor N. Nemykin

12. High-throughput computational discovery of ternary-layered MAX phases and prediction of their exfoliation for formation of 2D MXenes 286
 Nanoscale, 13[15] (2021) pp.7294-7307
 Rasoul Khaledialidusti, Mohammad Khazaei, Somayeh Khazaei and Kaoru Ohno

13. Stabilization of Superionic-Conducting High-Temperature Phase of Li(CB₉H₁₀) via Solid Solution Formation with Li₂(B₁₂H₁₂) 300
 Crystals, 11[4] (2021) Art.No.330
 Sangryun Kim, Kazuaki Kisu and Shin-ichi Orimo

14. MXene Phase with C₃ Structure Unit: A Family of 2D Electrides 310
 Adv. Funct. Mater., 31[24] (2021) Art.No.2100009
 Soungmin Bae, William Espinosa-García, Yoon-Gu Kang, Noriyuki Egawa,
 Juho Lee, Kazuaki Kuwahata, Mohammad Khazaei, Kaoru Ohno, Yong-Hoon Kim,
 Myung Joon Han, Hideo Hosono, Gustavo M. Dalpian and Hannes Raebiger

15. Formation energies of θ -Al₂Cu phase and precursor Al-Cu compounds: Importance of on-site Coulomb repulsion 318
 Comput. Mater. Sci, 194 (2021) Art.No.110461
 M. Souissi, C.M. Fang, R. Sahara and Z. Fan

16. Flat Zigzag Silicene Nanoribbon with Be Bridge 325
 ACS Omega, 6[18] (2021) pp.12099-12104
 Masae Takahashi

17. Calculation-driven design of off-equiatomic high-entropy alloys with enhanced solid-solution strengthening 331
 Mater. Sci. Eng., A, 817 (2021) Art.No.141359
 Jiaxiang Li, Kenta Yamanaka and Akihiko Chiba

18. Role of OH Termination in Mitigating Friction of Diamond-like Carbon under High Load: A Joint Simulation and Experimental Study 339
 Langmuir, 37[20] (2021) pp.6292-6300
 Yang Wang, Kentaro Hayashi, Yusuke Ootani, Shandan Bai, Tomomi Shimazaki,
 Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Maria-Isabel De Barros Bouchet,
 Jean Michel Martin and Momoji Kubo

19. First-principles investigation of magnetic and transport properties in hole-doped shandite compounds $\text{Co}_3\text{In}_x\text{Sn}_{2-x}\text{S}_2$ 348
Phys. Rev. B, 103[20] (2021) Art.No.205112
Yuki Yanagi, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Kentaro Nomura, Atsushi Tsukazaki and Michi-To Suzuki
20. Dissociation of hydrogen peroxide in water and methanol through a biased molecular dynamics investigation 356
J. Comput. Chem., 42[19] (2021) pp.1344-1353
Hieu C. Dong, Thi H. Ho, Thu M. Nguyen, Yoshiyuki Kawazoe and Hung M. Le
21. A computational study on the complexation of bisbenzimidazolyl derivatives with cucurbituril and cyclohexylcucurbituril 366
J. Inclusion Phenom. Macrocyclic Chem., 100 (2021) pp.217-231
N. S. Venkataramanan, A. Suvitha, R. Sahara and Y. Kawazoe
22. A theoretical investigation of topological phase modulation in carbide MXenes: Role of image potential states 381
Carbon, 181 (2021) pp.370-378
Mengying Wang, Ahmad Ranjbar, Thomas D. Kühne, Rodion V. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe and Yunye Liang
23. Essential role of the anisotropic magnetic dipole in the anomalous Hall effect 390
Phys. Rev. B, 103[18] (2021) Art.No.L180407
Satoru Hayami and Hiroaki Kusunose
24. Crystal Structures of β -Methylchalcogenated Tetrathienoacenes: From One-Dimensional π -Stacking to Sandwich Pitched π -Stacking Structure 395
Cryst. Growth Des., 21[7] (2021) pp.4055-4063
Kazuo Takimiya, Kiseki Kanazawa and Kohsuke Kawabata

25. Heterogeneous yielding mechanisms of body centered cubic iron for high resistance to chemical reaction-induced deterioration in supercritical water environments: A reactive molecular dynamics study404
 Scr. Mater., 202 (2021) Art.No.113997
 Qian Chen, Jing Zhang, Zhongmin Liu, Yang Wang, Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

26. Effect of Al doping on the early-stage oxidation of Ni-Al alloys: A ReaxFF molecular dynamics study 409
 Appl. Surf. Sci., 563 (2021) Art.No.150097
 Liu Chen, Hubin Luo, Zhencheng Li and Aixue Sha

27. Effect of axial molecules and linker length on CO₂ adsorption and selectivity of CAU-8: a combined DFT and GCMC simulation study 418
 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

28. Creation of Mo/Tc@C₆₀ and Au@C₆₀ and molecular-dynamics simulations 428
 RSC Adv., 11[32] (2021) pp.19666-19672
 Tsutomu Ohtsuki, Aaditya Manjanath, Kaoru Ohno, Makoto Inagaki, Shun Sekimoto and Yoshiyuki Kawazoe

29. Dissociative Adsorption of N₂ onto Size-Selected Ti_n⁺ and Ti_nO⁺ (*n*≤16) toward Nitrogen Fixation 435
 J. Phys. Chem. A, 125[23] (2021) pp.5048-5053
 Masahiko Ichihashi, Tetsu Hanmura and Hideho Odaka

30. Colossal barocaloric effects in the complex hydride Li₂B₁₂H₁₂ 441
 Sci. Rep., 11 (2021) Art.No.11915
 Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo, Daniel Errandonea, Dewei Chu and Claudio Cazorla

31. Effect of the Pt concentration on microstructures of Ti-Pt alloys using the first-principles phase field method 450
Acta Mater., 215 (2021) Art.No.117050
Thi Nu Pham, Kaoru Ohno, Ryoji Sahara, Riichi Kuwahara and Swastibrata Bhattacharyya
32. Unraveling the effects of Nb interface segregation on ferrite transformation kinetics in low carbon steels 459
Acta Mater., 215 (2021) Art.No.117081
Haokai Don, Yongjie Zhang, Goro Miyamoto, Masahiro Inomoto, Hao Chen, Zhigang Yang and Tadashi Furuhashi
33. Activity-Selectivity Enhancement and Catalytic Trend of CO₂ Electroreduction on Metallic Dimers Supported by N-Doped Graphene: A Computational Study 474
J. Phys. Chem. C, 125[24] (2021) pp.13176-13184
Huong T. D. Bui, Viet Q. Bui, Xiaodong Shao, Ashwani Kumar, Seong-Gon Kim, Hung M. Le, Yoshiyuki Kawazoe and Hyoyoung Lee
34. Improving Thermodynamic Stability of SmFe₁₂-Type Permanent Magnets from High Entropy Effect 483
J. Phase Equilib. Diffus., 42 (2021) pp.592-605
Arkapol Saengdeejing and Ying Chen
35. Selective Wear Behaviors of a Water-Lubricating SiC Surface under Rotating-Contact Conditions Revealed by Large-Scale Reactive Molecular Dynamics Simulations 497
J. Phys. Chem. C, 125[27] (2021) pp.14957-14964
Yang Wang, Keita Yukinori, Ryo Koike, Yusuke Ootani, Koshi Adachi and Momoji Kubo
36. Stability and Thermodynamics Properties of CrFeNiCoMn/Pd High Entropy Alloys from First Principles 505
J. Phase Equilib. Diffus., 42 (2021) pp.606-616
Nguyen-Dung Tran, Arkapol Saengdeejing, Ken Suzuki, Hideo Miura and Ying Chen

37. Development of Highly Sensitive Strain Sensor Using Area-Arrayed Graphene Nanoribbons 516
 Nanomaterials, 11[7] (2021) Art.No.1701
 Ken Suzuki, Ryohei Nakagawa, Qinqiang Zhang and Hideo Miura
38. Electron dynamics of tip-tunable oxygen species on TiO₂ surface 525
 Commun. Mater., 2 (2021) Art.No.71
 Yuuki Adachi, Ján Brndiar, Huan Fei Wen, Quanzhen Zhang, Masato Miyazaki, Sourbh Thakur, Yasuhiro Sugawara, Hongqian Sang, YanJun Li, Ivan Štich and Lev Kantorovich
39. “Manipulation” of Crystal Structure by Methylthiolation Enabling Ultrahigh Mobility in a Pyrene-Based Molecular Semiconductor 532
 Adv. Mater., 33[32] (2021) Art.No.2102914
 Kazuo Takimiya, Kirill Bulgarevich, Mamatimin Abbas, Shingo Horiuchi, Takuya Ogaki, Kohsuke Kawabata and Abduleziz Ablat
40. Spin and anomalous Hall effects emerging from topological degeneracy in the Dirac fermion system CuMnAs 541
 Phys. Rev. B, 104[3] (2021) Art.No.035110
 Vu Thi Ngoc Huyen, Yuki Yanagi and Michi-To Suzuki
41. Spin-orbital-momentum locking under odd-parity magnetic quadrupole ordering 553
 Phys. Rev. B, 104[4] (2021) Art.No.045117
 Satoru Hayami and Hiroaki Kusunose
42. Atomistic origin of compositional pulling effect in wurtzite (B, Al, In)_xGa_{1-x}N: A first-principles study 569
 J. Appl. Phys., 130[3] (2021) Art.No.035704
 Hiroshi Mizuseki, Jessiel Siaron Gueriba, Melvin John F. Empizo, Nobuhiko Sarukura, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuhiro Ohkawa
43. Viscosity Overshoot in Biaxial Elongational Flow: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ring-Linear Polymer Mixtures 575
 Macromolecules, 54[15] (2021) pp.7210-7225
 Takahiro Murashima, Katsumi Hagita and Toshihiro Kawakatsu

44. Hex-C₅₅₈: A new porous metallic carbon allotrope for lithium-ion battery anode 591
Carbon, 183 (2021) pp.652-659
Dongyuan Ni, Yiheng Shen, Yupeng Shen, Qian Wang, Y. Kawazoe and Puru Jena
45. Different Etching Mechanisms of Diamond by Oxygen and Hydrogen Plasma: a Reactive Molecular Dynamics Study 599
J. Phys. Chem. C, 125[30] (2021) pp.16711-16718
Jingxiang Xu, Kang Lu, Ding Fan, Yang Wang, Shaolin Xu and Momoji Kubo
46. Highly Electron-Donating Bipyranlydene Derivatives: Potential n-Type Dopants for Organic Thermoelectrics 607
Adv. Energy Sustainability Res., 2[11] (2021) Art.No.2100084
Takaya Matsuo, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
47. Molecular Dynamics Simulations of Ring Shapes on a Ring Fraction in Ring-Linear Polymer Blends 616
Macromolecules, 54[17] (2021) pp.8043-8051
Katsumi Hagita and Takahiro Murashima
48. Development of a prototype thermodynamic database for Nd-Fe-B permanent magnets 625
Sci. Technol. Adv. Mater., 22[1] (2021) pp.557-570
Taichi Abe, Masao Morishita, Ying Chen, Arkapol Saengdeejing, Kiyoshi Hashimoto, Yoshinao Kobayashi, Ikuo Ohnuma, Toshiyuki Koyama and Satoshi Hirose
49. Multipole classification in 122 magnetic point groups for unified understanding of multiferroic responses and transport phenomena 639
Phys. Rev. B, 104[5] (2021) Art.No.054412
Megumi Yatsushiro, Hiroaki Kusunose and Satoru Hayami
50. Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. I. Quantitative Spectra 680
J. Phys. Chem. B, 125[34] (2021) pp.9794-9803
Ryo Murata, Ken-ichi Inoue, Lin Wang, Shen Ye and Akihiro Morita

51. Accelerated Kinetics Revealing Metastable Pathways of Magnesium-Induced Transformations in MnO₂ Polymorphs 690
Chem. Mater., 33[17] (2021) pp.6983-6996
Takuya Hatakeyama, Hongyi Li, Norihiko L. Okamoto, Kohei Shimokawa, Tomoya Kawaguchi, Hiroshi Tanimura, Susumu Imashuku, Maximilian Fichtner and Tetsu Ichitsubo
52. Atom-by-Atom and Sheet-by-Sheet Chemical Mechanical Polishing of Diamond Assisted by OH Radicals: A Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation Study 704
ACS Appl. Mater. Interfaces, 13[34] (2021) pp.41231-41237
Kentaro Kawaguchi, Yang Wang, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
53. A study on the effect of the number of clusters at the phase transformation kinetics ... 711
J. Mater. Res. Technol., 15 (2021) pp.777-784
Nathan Fernandes Ignácio, Maisa Silva Fernandes, Diego Magalhães Baía, Ana Gabriela Conceição dos Santos, Felipe da Silva Siqueira, Wesley Luiz da Silva Assis and Paulo Rangel Rios
54. Defect enriched hierarchical iron promoted Bi₂MoO₆ hollow spheres as efficient electrocatalyst for water oxidation 719
Chem. Eng. J., 426 (2021) Art.No.131884
Sakila Khatun, Koji Shimizu, Soumen Singha, Rajat Saha, Satoshi Watanabe and Poulomi Roy
55. Intermolecular interactions in microhydrated ribonucleoside and deoxyribonucleoside: A computational study 730
Comput. Theor. Chem., 1204 (2021) Art.No.113422
Venkataramanan Natarajan Sathiyamoorthy, Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
56. Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. II. Implication to Sum Frequency Generation Spectroscopy 738
J. Phys. Chem. B, 125[34] (2021) pp.9804-9810
Lin Wang, Ryo Murata, Ken-ichi Inoue, Shen Ye and Akihiro Morita

57. First-Principles Calculations of Stability, Electronic Structure, and Sorption Properties of Nanoparticle Systems 745
J. Comput. Chem. Jpn., 20[2] (2021) pp.23-47
Gerardo Valadez Huerta, Yusuke Nanba, Nor Diana Binti Zulkifli,
David Samuel Rivera Rocabado, Takayoshi Ishimoto and Michihisa Koyama
58. Honeycomb Boron on Al(111): From the Concept of Borophene to the Two-Dimensional Boride 770
ACS Nano, 15[9] (2021) pp.15153-15165
Alexei B. Preobrajenski, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu, Nikolay A. Vinogradov
and Alexander S. Vinogradov
59. Enhanced Selectivity in Volatile Organic Compound Gas Sensors Based on ReS₂-FETs under Light-Assisted and Gate-Bias Tunable Operation 783
ACS Appl. Mater. Interfaces, 13[36] (2021) pp.43030-43038
Amir Zulkefli, Bablu Mukherjee, Ryoji Sahara, Ryoma Hayakawa, Takuya Iwasaki,
Yutaka Wakayama and Shu Nakaharai
60. Exploration of Gas-Liquid Interfaces for Liquid Water and Methanol Using Extreme Ultraviolet Laser Photoemission Spectroscopy 792
J. Phys. Chem. B, 125[37] (2021) pp.10514-10526
Yo-ichi Yamamoto, Tatsuya Ishiyama, Akihiro Morita and Toshinori Suzuki
61. Hydrogen Atom Abstraction by Heterogeneous-Homogeneous Hybrid Catalyst of CeO₂ and 2-Cyanopyridine via Redox of CeO₂ for C-H Bond Oxidation with Air 805
ACS Catal., 11[19] (2021) pp.11867-11872
Masazumi Tamura, Eiji Sagawa, Akira Nakayama, Yoshinao Nakagawa and
Keiichi Tomishige
62. What is the Enthalpy Contribution to the Stabilization of the Co–Cr–Fe–Mn–Ni Faced-centered Cubic Solid Solution? 811
J. Phase Equilib. Diffus., 42 (2021) pp.561-570
Guillaume Bracq, Jean-Claude Crivello, Mathilde Laurent-Brocq, Jean-Marc Joubert
and Ivan Guillot

63. Quinoid-Aromatic Resonance for Very Small Optical Energy Gaps in Small-Molecule Organic Semiconductors: A Naphthodithiophenedione-oligothiophene Triad System ...821
Chem. Eur. J., 27[63] (2021) pp.15660-15670
Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
64. Lagrangian multiscale simulation of complex flows 832
Phys. Fluids, 33[9] (2021) Art.No.093106
Yohei Morii and Toshihiro Kawakatsu
65. Computational modeling of a 3D matrix of duplex stainless steel and its ultimate strength in function of the sigma phase evolution..... 851
J. Mater. Res. Technol., 15 (2021) pp.2625-2632
Ana Gabriela Conceição dos Santos, Nathan Fernandes Ignácio,
Maisa Silva Fernandes, Diego Magalhães Baía, Fernanda Nascimento Moreira,
Wesley Luiz da Silva Assis and Paulo Rangel Rios
66. Low temperature study of phase equilibria in the Co–Ni–W ternary system: Evidence of a new intermetallic phase Co_3W-D0_a 859
J. Alloys Compd., 892 (2021) Art.No.162109
Nicolas Bouliez, Jérôme Andrieux, Rodica Chiriac, François Toche,
Jean-Claude Crivello, Bruno Gardiola, Sophie Cazottes, Florence Robaut,
Rafael Cury and Olivier Dezellus
67. Current Understanding of Microstructure and Properties of Micro-Alloyed Low Carbon Steels Strengthened by Interphase Precipitation of Nano-Sized Alloy Carbides: A Review 869
JOM, 73 (2021) pp.3214-3227
Y.-J. Zhang, E. Chandiran, H.-K. Dong, N. Kamikawa, G. Miyamoto and T. Furuwara
68. Stability and structural properties of vacancy-ordered and -disordered ZrC_x 883
RSC Adv., 11[52] (2021) pp.32573-32589
Theresa Davey, Ken Suzuki, Hideo Miura and Ying Chen

69. Evidence for mechanical softening-hardening dual anomaly in transition metals from shock-compressed vanadium900
Phys. Rev. B, 104[13] (2021) Art.No.134102
Hao Wang, J. Li, X. M. Zhou, Y. Tan, L. Hao, Y. Y. Yu, C. D. Dai, K. Jin, Q. Wu, Q. M. Jing, X. R. Chen, X. Z. Yan, Y. X. Wang and Hua Y. Geng
70. Guaiacol Hydrodeoxygenation over Iron–Ceria Catalysts with Platinum Single-Atom Alloy Clusters as a Promoter909
ACS Catal., 11[20] (2021) pp.12794-12814
Congcong Li, Yoshinao Nakagawa, Mizuho Yabushita, Akira Nakayama and Keiichi Tomishige
71. Sm-Ti binary thermodynamic database and phase diagram930
Calphad, 75 (2021) Art.No.102357
Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Osamu Takeda, Masanori Enoki, Satoshi Sugimoto, Hiroshi Ohtani and Abe Taichi
72. Clusters of Cesium-Lead-Iodide Perovskites in the Zeolite Matrix940
ACS Omega, 6[42] (2021) pp.27711-27715
Igor Dmitruk, Yelyzaveta Vikhrova, Andriy Dmytruk, Nataliya Berezovska, Yuri Barnakov, Polina Vartik and Rodion V. Belosludov
73. Structure and Properties of Heavily B and P Codoped Amorphous Silicon Quantum Dots945
J. Phys. Chem. C, 125[42] (2021) pp.23267-23274
R. Turansky, J. Brndiar, A. Pershin, Á. Gali, H. Sugimoto, M. Fujii and I. Štich
74. Organic compound modification of CeO₂ and 2-cyanopyridine hybrid catalyst in carbonate synthesis from CO₂ and alcohols953
J. CO₂ Util., 54 (2021) Art.No.101744
Masazumi Tamura, Daiki Hiwatashi, Yu Gu, Akira Nakayama, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige

75. Structural Characterization of Nickel-Doped Aluminum Oxide Cations by Cryogenic Ion Trap Vibrational Spectroscopy963
 J. Phys. Chem. A, 125[43] (2021) pp.9527-9535
 Ya-Ke Li, Mark C. Babin, Sreekanta Debnath, Takeshi Iwasa, Sonu Kumar, Tetsuya Taketsugu, Knut R. Asmis, Andrey Lyalin and Daniel M. Neumark
76. 鉄鋼における熱力学物性値の電子論計算と Fe-Mo-B 三元系理論状態図への応用972
 鉄と鋼, 107[11] (2021) pp.923-933
 榎木勝徳、高橋宏太、三富崇永、大谷博司
77. Local ordering and interatomic bonding in magnetostrictive $\text{Fe}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{X}$ (X=Ni, Cu, Co, La) alloy983
 Comput. Mater. Sci., 202 (2021) Art.No.110934
 Talgat M.Inerbaev, Aisulu Abuova, Yoshiyuki Kawazoe and Rie Umetsu
78. First-Principles Investigation on Work Function of Martensitic Carbon Steels: Effect of Interstitial Carbon on Anodic Dissolution Resistance990
 J. Electrochem. Soc., 168 (2021) Art.No.111503
 Mariko Kadowaki, Arkapol Saengdeejing, Izumi Muto, Ying Chen, Takashi Doi, Kaori Kawano, Yu Sugawara and Nobuyoshi Hara
79. Thermodynamic Stabilities of PdRuM (M = Cu, Rh, Ir, Au) Alloy Nanoparticles Assessed by Wang-Landau Sampling Combined with DFT Calculations and Multiple Regression Analysis 1000
 Bull. Chem. Soc. Jpn., 94[10] (2021) pp.2484-2492
 Yusuke Nanba and Michihisa Koyama
80. Computational Screening of Efficient Additive Elements to Stabilize the Interface between Cu Matrix and Ni_2Si Precipitates in Cu-Ni-Si Alloys 1009
 Journal of Japan Institute of Copper, 60[1] (2021) pp.293-297
 Eun-Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi, Jehyun Lee and Sung Hwan Lim

81. General-purpose neural network interatomic potential for the α -iron and hydrogen binary system: Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement 1014
 Phys. Rev. Mater., 5[11] (2021) Art.No.113606
 Fan-Shun Meng, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Hideki Mori, Peijun Yu,
 Kazuki Matsubara, Nobuyuki Ishikawa and Shigenobu Ogata
82. Skyrmion-size dependence of the topological Hall effect: A real-space calculation 1030
 Phys. Rev. B, 104[17] (2021) Art.No.174432
 Akira Matsui, Takuya Nomoto and Ryotaro Arita
83. Normalization of exact quasiparticle wave functions in the Green's function method guaranteed by the Ward identity 1036
 Phys. Rev. B, 104 (2021) Art.No.L201116
 Takeru Nakashima, Hannes Raebiger and Kaoru Ohno
84. Voltage- and Redox State-Triggered Oxygen Adatom Conductance Switch 1042
 J. Phys. Chem. C, 125[48] (2021) pp.26801-26807
 Quanzhen Zhang, Ján Brndiar, Yuuki Adachi, Martin Konôpka, Huan Fei Wen,
 Masato Miyazaki, Yasuhiro Sugawara, Rui Xu, Zhi Hai Cheng, Hongqian Sang,
 Yan Jun Li, Lev Kantorovich and Ivan Štich
85. Unraveling the Charge States of Au Nanoclusters on an Oxygen-Rich Rutile TiO₂(110) Surface and Their Triboelectrification Overturn by nc-AFM and KPFM 1049
 J. Phys. Chem. C, 125[50] (2021) pp.27607-27614
 Quanzhen Zhang, Ján Brndiar, Martin Konôpka, Huan Fei Wen, Yuuki Adachi,
 Masato Miyazaki, Robert Turanský, Rui Xu, Zhi Hai Cheng, Yasuhiro Sugawara,
 Ivan Štich and Yan Jun Li
86. Boron-Functionalized Organic Framework as a High-Performance Metal-Free Catalyst for N₂ Fixation 1057
 J. Phys. Chem. Lett., 12[50] (2021) pp.12142-12149
 Wenyang Zhou, Haoming Shen, Huanhuan Xie, Yiheng Shen, Wei Kang, Qian Wang,
 Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

87. Heterogeneous Enantioselective Hydrogenation of Ketones by 2-Amino-2'-hydroxy-1,1'-binaphthyl-Modified CeO₂-Supported Ir Nanoclusters 1065
ACS Catal., 12[2] (2021) pp.868-876
Masazumi Tamura, Nao Hayashigami, Akira Nakayama, Yoshinao Nakagawa and Keiichi Tomishige

<2022 年>

1. Supervised deep learning prediction of the formation enthalpy of complex phases using a DFT database: The σ -phase as an example..... 1074
Comput. Mater. Sci., 201 (2022) Art.No.110864
Jean-Claude Crivello, Jean-Marc Joubert and Nataliya Sokolovska
2. Electronic structure of $\text{Li}^+@C_{60}$ adsorbed on methyl-ammonium lead iodide perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ surfaces..... 1081
Mater. Adv., 3[1] (2022) pp.290-299
Khian-Hooi Chew, Riichi Kuwahara and Kaoru Ohno
3. Packing structures of (trialkylsilyl)ethynyl-substituted dinaphtho[2,3-*b*:2',3'-*f*]thieno[3,2-*b*]thiophenes (DNTTs): effects of substituents on crystal structures and transport properties..... 1091
J. Mater. Chem. C, 10[7] (2022) pp.2775-2782
Kazuo Takimiya, Sayaka Usui, Aoi Sato, Kiseki Kanazawa and Kohsuke Kawabata
4. Enantiopure 2-(2-ethylhexyl)dinaphtho [2,3-*b*:2',3'-*f*]thieno[3,2-*b*]thiophenes: synthesis, single-crystal structure and a surprising lack of influence of stereoisomerism on thin-film structure and electronic properties 1099
Mater. Horiz., 9[1] (2022) pp.444-451
Kenta Sumitomo, Yuta Sudo, Kiseki Kanazawa, Kohsuke Kawabata and Kazuo Takimiya
5. Systematic Analysis Method for Nonlinear Response Tensors 1107
J. Phys. Soc. Jpn., 91[1] (2022) Art.No.014701
Rikuto Oiwa and Hiroaki Kusunose
6. Role of chain crossing prohibition on chain penetration in ring-linear blends through dissipative particle dynamics simulations 1126
Comput. Mater. Sci., 203 (2022) Art.No.111104
Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Hayato Shiba, Nobuyuki Iwaoka and Toshihiro Kawakatsu

14. Cubic halide perovskites as potential low thermal conductivity materials: A combined approach of machine learning and first-principles calculations 1198
Phys. Rev. B, 105[1] (2022) Art.No.014310
Xinming Wang, Yinchang Zhao, Shuming Zeng, Zhuchi Wang, Ying Chen and Jun Ni
15. Enhanced hardening by multiple microalloying in low carbon ferritic steels with interphase precipitation 1209
Scr. Mater., 212 (2022) Art.No.114558
Yongjie Zhang, Goro Miyamoto and Tadashi Furuhashi
16. Terahertz Frequency Shifts due to Multiphonon Scattering in Thiamin Crystals Containing Hydrated Ions 1216
Appl. Phys. Lett., 120[5] (2022) Art.No.051104
Masae Takahashi, Mitsuru Kowada, Hiroshi Matsui, Eunsang Kwon and Yuka Ikemoto
17. Three-dimensional tetrahexcarbon: Stability and properties 1222
Mater. Today Phys., 23 (2022) Art.No.100628
K. Hussain, P.H. Du, T. Mahmood, Y. Kawazoe and Q. Sun
18. Ab Initio Molecular Dynamics Simulations for Adsorption Structures of Picolinic Acid at the Water/CeO₂ Interface 1229
J. Phys. Chem. C, 126[7] (2022) pp.3404-3410
Tomotaka Seki, Kosuke Takeda and Akira Nakayama
19. Unraveling the Unstable Nature of Tetraglyme-Based Electrolytes toward Superoxide and the Inhibitory Effect of Lithium Ions by Using In Situ Vibrational Spectroscopies 1236
J. Phys. Chem. C, 126[6] (2022) pp.2980-2989
Aimin Ge, Ryuuta Nagai, Chengyang Xu, Koki Kannari, Baoxu Peng, Ken-ichi Inoue, Akihiro Morita and Shen Ye
20. Molecular-Level Elucidation of a Fracture Process in Slide-Ring Gels via Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations 1246
Macromolecules, 55[6] (2022) pp.1946-1956
Shuichi Uehara, Yang Wang, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo

21. Electronic Structures of Group III–V Element Haeckelite Compounds: A Novel Family of Semiconductors, Dirac Semimetals, and Topological Insulators 1257
 Adv. Funct. Mater., 32[20] (2022) Art.No.2110930
 Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Yoon-Gu Kang, Yunye Liang,
 Rasoul Khaledialidusti, Soungmin Bae, Hannes Raebiger, Vei Wang,
 Myung Joon Han, Hiroshi Mizoguchi, Mohammad S. Bahramy, Thomas D. Kühne,
 Rodion V. Belosludov, Kaoru Ohno and Hideo Hosono

22. Vacancy ordering in substoichiometric zirconium carbide: A review 1267
 Int. J. Ceram. Eng. Sci., 4[3] (2022) pp.134-157
 Theresa Davey and Ying Chen

23. Unraveling the Factors Affecting the Mechanical Properties of Halide Perovskites from First-Principles Calculations 1291
 J. Phys. Chem. C, 126[9] (2022) pp.4715-4725
 Shuang Li, Shenggui Zhao, Huiqi Chu, Yue Gao, Peng Lv, Vei Wang, Gang Tang and Jiawang Hong

24. Ultrathin (In, Mg) films on Si(111): A nearly freestanding double-layer metal 1302
 Phys. Rev. B, 105[12] (2022) Art.No.125402
 Shigemi Terakawa, Shinichiro Hatta, Hiroshi Okuyama and Tetsuya Aruga

25. Charge State Tristability of Oxygen Adatom on a Rutile TiO₂(110)-(1 × 1) Surface Controlled by Atomic Force Microscopy 1311
 J. Phys. Chem. C, 126[10] (2022) pp.5064-5069
 Yuuki Adachi, Huan Fei Wen, Quanzhen Zhang, Masato Miyazaki,
 Yasuhiro Sugawara, Ján Brndiar, Lev Kantorovich, Ivan Štich and Yan Jun Li

26. Collective bath coordinate mapping of “hierarchy” in hierarchical equations of motion 1317
 J. Chem. Phys., 156[10] (2022) Art.No.104104
 Tatsushi Ikeda and Akira Nakayama

27. Excellently balanced water-intercalation-type heat-storage oxide..... 1333
Nat. Commun., 13 (2022) Art.No.1452
Takuya Hatakeyama, Norihiko L. Okamoto, Satoshi Otake, Hiroaki Sato, Hongyi Li
and Tetsu Ichitsubo
28. Chemical-Reaction-Induced deformation of Body-Centered cubic iron in supercritical
water leading to high risk of cleavage Fracture: A reactive Molecular dynamics study
..... 1342
Comput. Mater. Sci, 208 (2022) Art.No.111354
Qian Chen, Jingxiang Xu, Yixin Su, Shuichi Uehara, Shandan Bai, Yang Wang,
Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo
29. Wannier-based implementation of the coherent potential approximation with applications
to Fe-based transition metal alloys..... 1349
Phys. Rev. B, 105[12] (2022) Art.No.125136
Naohiro Ito, Takuya Nomoto, Koji Kobayashi, Sergiy Mankovsky, Kentaro Nomura,
Ryotaro Arita, Hubert Ebert and Takashi Koretsune
30. Phase diagram of the three-orbital Hubbard-Holstein model simulating Superconducting
Tungsten Bronze A_xWO_3 1359
J. Phys. Conf. Ser., 2164 (2022) Art.No.012012
Takuya Sekikawa and Yoshiaki Ōno
31. Temperature and doping dependence of the singlet and triplet pair susceptibilities in the
one-band Hubbard model based on the dynamical mean-field theory 1363
J. Phys. Conf. Ser., 2164 (2022) Art.No.012017
Yusuke Inokuma and Yoshiaki Ōno

Ⅲ. 国際会議発表論文

< Proceeding >

1. Theoretical study on strain-controllable gradient Schottky barrier of dumbbell-shape graphene nanoribbon for highly sensitive strain sensors 1367
IEEE Xplore, Proceedings of 2021 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), (2021) pp.171-174
Qinqiang Zhang, Ken Suzuki and Hideo Miura

<2021 年>

1. Prediction of stability and catalytic properties of multi-element nano-alloys based on first-principles calculations of real systems 1371
International Online Conference on Nano Materials (ICN 2021)
Online (2021.4.9-11) No.PL 12 (Plenary)
Michihisa Koyama
2. Improvement of Thermoelectric Efficiency of Si-based Clathrate 1372
2021 Virtual MRS Spring Meeting & Exhibit
Virtual Conference (2021.4.17-23) No.NM08.10.02 (Oral)
Masato Ohnishi, Koji Fujimura, Takahiro Yamamoto, Hiroshi Shimizu,
Kiyoshi Yamamoto and Junichiro Shiomi
3. X-ray induced femtosecond ionization kinetics of tropone (C₇H₆O) at carbon *K*-edge 1373
36th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics
Online (2021.4.22) No.1A1 (Oral)
Kaoru Yamazaki and Katsumi Midorikawa
4. Development of high-strength and high wear resistance copper alloy based on DFT calculations 1375
Recycling Korea 2021
Yeosu, Korea (2021.5.13) (Oral)
E.-A. Choi, S. Z. Han, J. Ahn and S. H. Lim
5. First-principles Study of Thermodynamic Stability of Light Elements (B, C and N) Doping in SmFe₁₂ Compounds 1377
The 26th International Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and their Applications (REPM2021)
Online (2021.6.7-10) (Oral)
Arkapol Saengdeejing and Ying Chen

6. Theoretical explorations of order-disorder transitions in zirconium carbide for the purpose of assisting synthesis 1380
 International Conference on "Materials for Humanity" (MH 21)
 Online (2021.7.6-9) (Oral)
 Theresa Davey and Ying Chen

7. Effect of long-wavelength fluctuations on slow relaxation in a 2D glass-forming liquid 1381
 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2021)
 Online(Coventry, England) (2021.8.2-5) No.SM4.7 (Oral)
 Hayato Shiba, Takeshi Kawasaki and Kang Kim

8. The first-principles phase field method for predicting microstructure of alloys 1382
 ACCMS Webinar series
 Online (2021.8.24) No.Webinar #1 (Invited)
 Kaoru Ohno

9. Microscopic Mechanisms of Facilitated Ion Transfer and Electron Transfer Reaction at Liquid-Liquid Interface..... 1383
 The 7th Quantum Science Symposium, ICCMSE 2021 - Computational Chemistry and Computational Physics
 Online (2021.9.4-7) (Plenary)
 A. Morita, A. Koizumi and T. Hirano

10. Full first-principles calculation of oxygen self-diffusion in ceramic oxides..... 1384
 International Materials Applications & Technologies Conference and Exposition - IMAT
 Online (2021.9.13-16) (Invited)
 Ying Chen, Hubin Luo, Lei Wang and Tetsuo Mohri

11. “Manipulation” of crystal structures of pyrene-based organic semiconductors enabling ultrahigh mobility 1385
 The international Conference on Flexible and Printed Electronics
 Online (2021.9.27-10.1) No.1Rm406-10-04 (Invited)
 Kazuo Takimiya and Kirill Bulgarevich

12. Stability prediction of the σ -phase using a supervised machine learning method 1386
 Intermetallics 2021
 Educational Center Kloster Banz, Germany (2021.10.4-8) No.O-MO-03 (Oral)
 Jean-Claude Crivello, Jean-Marc Joubert and Nataliya Sokolovska
13. Order-disorder Relationships in Zirconium Carbides 1387
 The Materials Science & Technology (MS&T) 2021
 Online (2021.10.17-20) (Oral)
 Theresa Davey and Ying Chen
14. Facet Engineering of Iron Oxide by Hydrothermal Organic Modification 1388
 The 7th International Solvothermal and Hydrothermal Association Conference,
 ISHA 2021
 Virtual Conference (2021.10.26-28) No.I-06 (Invited)
 Akira Yoko, Yuta Watanabe, Gimyeong Seong, Takaaki Tomai and
 Tadafumi Adschiri
15. Construction of neural network potential to investigate interface structures of
 metal/Li₃PO₄ 1389
 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems
 (MEMRISYS2021)
 Virtual Conference (2021.11.1-4) No.1A-3 (Oral)
 K. Shimizu, W. Liu, W. Li, Y. Ando, E. Minamitani and S. Watanabe
16. Alloying Process at the Interface of Au-Li Studied Using Neural Network Potential
 1390
 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS9)
 Online (2021.11.28-12.1) No.30pD-5 (Oral)
 Koji Shimizu, Elvis F. Arguelles, Wenwen Li, Yasunobu Ando, Emi Minamitani and
 Satoshi Watanabe

17. Manipulation of crystal structures of pyrene-based organic semiconductors enabling ultrahigh mobility 1391
 The 28th International Display Workshops (IDW '21)
 Virtual Conference (2021.12.1-3) No.AMD4/AIS6-3L (Invited)
 Kazuo Takimiya, Kirill Bulgarevich, Mamatimin Abbas, Shingo Horiuchi,
 Takuya Ogaki, Kohsuke Kawabata and Abduleziz Ablat

18. Cross-Correlated Phenomena Viewed from Electronic Multipoles 1393
 Asia-Pacific Conference on Condensed Matter Physics 2021 (AC2MP2021)
 Online (2021.12.1-3) (Keynote)
 Hiroaki Kusunose

19. The effect of oxygen on the vacancy ordering and stability of UHTC transition metal carbides 1394
 PACRIM 2021
 Online (2021.12.13-16) No.PACRIM-398-2021 (Oral)
 Theresa Davey and Ying Chen

20. Using uncertainty quantification of first-principles-only CALPHAD phase diagrams to guide sequential learning of unknown phases and energy contributions 1395
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online) (2021.12.13-17) No.A2-O7-10 (Oral)
 Theresa Davey and Ying Chen

21. Multi-scale MD Simulations of Extremely Slow Cooperative Diffusion of Epoxy Resin Molecules at Naturally Oxidized Si Substrates 1396
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online) (2021.12.13-17) No.C3-O2-04 (Oral)
 Katsumi Hagita, Tomohiro Miyata, Yohei Sato and Hiroshi Jinnai

22. Enhancing Thermoelectric Properties of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ Perovskite via High Pressure and Strain 1397
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online) (2021.12.13-17) No.E4-O6-06 (Oral)
 Qing Wang, Yongpeng Tang, Zenji Horita and Satoshi Iikubo

23. Influencing Factors for Lowering Order-Disorder Transition Temperature in Complex Metal Hydrides 1398
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online)(2021.12.13-17) No.E5-O7-03 (Oral)
 Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Sangryun Kim, Shigeyuki Takagi and Shin-ichi Orimo
24. Microscopic Dielectric Constant and Sum Frequency Generation Spectroscopy of Monolayer Interfaces Evaluated by Molecular Dynamics Simulation 1399
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online) (2021.12.13-17) No.E1-PR17-27 (Poster)
 Lin Wang and Akihiro Morita
25. First-principles Investigation of CrFeNiCoMn and CrFeNiCoMnPd Quinary High Entropy Alloys 1400
 MRM2021 Materials Research Meeting
 Yokohama, Japan (Online) (2021.12.13-17) (Poster)
 Tran Nguyen-Dung, Arkapol Saengdeejing and Ying Chen
26. Investigation of Low-lying Electronic States of Cobalt Cluster Ions by Helium Cluster Isolation Spectroscopy : Toward Catalysis Studies 1401
 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
 (PACIFICHEM 2021)
 USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Invited)
 Hideho Odaka, Yuya Yamazaki and Masahiko Ichihashi
27. Development and application of quadrupole susceptibility analyzer in SFG spectroscopy 1402
 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
 (PACIFICHEM 2021)
 USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Invited)
 A. Morita

28. New perspectives on chemical reactions and transport at liquid-liquid interfaces···· 1403
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
(PACIFICHEM 2021)
USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Invited)
A. Morita
29. Ozone oxidation of the unsaturated phospholipid monolayer in ambient air revealed by
HD-SFG spectroscopy·········· 1404
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
(PACIFICHEM 2021)
USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Oral)
Ken-ichi Inoue, Chunji Takada, Lin Wang, Akihiro Morita and Shen Ye
30. Molecular dynamics analysis on the interfacial affinity between organic-modified solid
and organic solvent·········· 1405
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
(PACIFICHEM 2021)
USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Poster)
Takamasa Saito, Ryo Takebayashi, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji,
Gota Kikugawa and Donatas Surblys
31. Theoretical Investigation of Sum Frequency Generation Spectroscopy on Carbon-based
Electrode-electrolyte Interfaces ··········· 1406
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
(PACIFICHEM 2021)
USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Poster)
Lin Wang and Akihiro Morita
32. Multidimensional free energy analysis on electron transfer mechanism at the oil/water
interface ··········· 1407
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies
(PACIFICHEM 2021)
USA (Virtual), Honolulu, Hawaii (2021.12.16-21) (Poster)
Tomonori Hirano and Akihiro Morita

<2022 年>

1. Effects of magnetostriction on excess loss in nanocrystalline soft magnetic materials. 1408
The 15th Joint MMM-INTERMAG Conference (2022 Joint)
New Orleans, LA (Virtual) (2022.1.10-14) No. COA-07 (Oral)
H. Tsukahara, H. Imamura, C. Mitsumata, K. Suzuki and K. Ono

2. Mechanism of vacancy ordering in substoichiometric zirconium carbide 1409
ICACC2022
Online (2022.1.24-28) (Invited)
Theresa Davey and Ying Chen

3. Vacancy Ordering in Zirconium Carbide Explored via First-principles Calculations and Calphad 1410
TMS2022 Annual Meeting & Exhibition
(Feb.27-Mar.3, CA, USA/online: Mar.15-Apr.30, 2022)
Virtual Conference (2022.2.27-3.3) (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

4. First-principles Study of Quaternary High Entropy Alloys Consisting of Fe-Ni-Co-Cr-Mn/Pd 1411
TMS2022 Annual Meeting & Exhibition
(Feb.27-Mar.3, CA, USA/online: Mar.15-Apr.30, 2022)
Virtual Conference (2022.2.27-3.3) (Poster)
Nguyen-Dung Tran, Chang Liu and Ying Chen

5. Thermodynamic Database of Sm-Ti Binary System from First-principles Calculations 1412
TMS2022 Annual Meeting & Exhibition
(Feb.27-Mar.3, CA, USA/online: Mar.15-Apr.30, 2022)
Virtual Conference (2022.2.27-3.3) (Poster)
Arkapol Saengdeejing and Ying Chen

6. Effect of Alloying Elements on the Stability of (Cr,Zr) Intermetallic Phases 1413
TMS2022 Annual Meeting & Exhibition
(Feb.27-Mar.3, CA, USA/online: Mar.15-Apr.30, 2022)
Virtual Conference (2022.2.27-3.3) (Poster)
Theresa Davey and Ying Chen

7. Exploring the Thermodynamic Properties of Actinium in Solution State by Utilization of Solvent Extraction Technique..... 1414
SMS2022&GIMRT User Meeting
Sendai International Center(online) (2022.3.2-3) No.C3 (Invited)
M. Nakase, M. Harigai, S. Sugawara, K. Shirasaki, S. Watanabe and T. Yamamura

8. Development of the short-term integrated program of education of materials science and human skills training -Case study of Professional development Consortium for Computational Materials Scientists in Japan- 1415
APS March Meeting 2022
Chicago (Online) (2022.3.14-18) No.W27.00013 (Oral)
Yayoi Terada

9. Extended Kohn-Sham theory applicable to arbitrary excited eigenstates 1416
ACCMS-ICMG-II
Online (2022.3.24-25) No.K-04 (Keynote)
Kaoru Ohno

IV. 紀要

<2022 年>

1. グラフニューラルネットワークによる長時間分子動力学予測と性能評価… 1417
情報処理学会研究報告 Vol. 2022-HPC-183 No. 22 pp. 1-11 (2022)
東京大学情報基盤センター 芝隼人、下川辺隆史

V. 予稿集

<2021 年>

1. Two-dimensional borophene: structure formation and properties 1428
Joint Symposium of Engineering & Information Science & WPI-ICReDD in
Hokkaido University
Online (2021.4.26) No.P6 (Oral)
A. Lyalin and T. Taketsugu
2. 多次元自由エネルギー計算による液液界面における電子移動反応機構の解明
..... 1429
第 23 回理論化学討論会
Online (2021.5.13-15) No.2L07 (Oral)
平野智倫、森田明弘
3. 水和イオン含有チアミン結晶の低振動吸収スペクトルの第一原理計算 1430
第 23 回理論化学討論会
Online (2021.5.13-15) No.2P26 (Poster)
小和田光瑠、陳思樊、菅野翔、高橋まさえ
4. 極低温クラスター複合体の生成と分光測定への適用 1431
ナノ学会第 19 回大会
名古屋(Online) (2021.5.20-22) No.P-63 (Poster)
尾高英穂、山崎祐哉、市橋正彦
5. 多元素系材料の熱力学安定配置探索のための Wang-Landau アルゴリズムの実装と多元素ナノ合金への応用 1432
日本コンピュータ化学会 2021 年春季年会
Online (2021.6.5-6) No.2O17 (Oral)
難波優輔、古山通久
6. 有機分子・水素結合系のテラヘルツ分光測定と第一原理計算 1434
日本学術振興会テラヘルツ波科学技術と産業開拓
第 182 委員会第 46 回研究会
Online (2021.7.30) (Invited)
高橋まさえ

7. マルチノード GPU を利用した大規模な高分子系の MD 計算の事例紹介 … 1435
第 2 回スーパーコンピュータ「不老」ユーザ会
Online (2021.8.30) (Oral)
萩田克美
8. ナノ結晶磁性体における局所的磁歪効果 …………… 1449
第 45 回日本磁気学会学術講演会
Online (2021.8.31-9.2) No.02aC-4 (Oral)
塚原宙、今村裕志、三俣千春、鈴木清策、小野寛太
9. 分子動力学法を用いた塩化物系フラックス溶融塩の構造および物性解析 … 1450
第 34 回日本セラミックス協会秋季シンポジウム
Online (2021.9.1-3) No.2B04 (Oral)
椎葉寛将、古山通久、手嶋勝弥
10. Mo-Ti-C 三元系における TiC の非化学量論構造 …………… 1451
日本セラミックス協会第 34 回秋季シンポジウム
Online (2021.9.1-3) No.1W03 (Oral)
井田駿太郎、星崎航太郎、金子昂弘、南茜、関戸信彰、吉見享祐
11. 環状鎖・線状鎖混合系の二軸伸長流動下におけるストレスオーバーシュートの
発見 …………… 1452
第 70 回高分子討論会
Online (2021.9.6-8) No.1I16 (Oral)
村島隆浩、萩田克美、川勝年洋
12. 人工知能 (AI) 技術を取り入れた核燃料開発研究の加速 (1)全体概要 …… 1454
日本原子力学会 2021 年秋の大会
Online (2021.9.8-10) No.1D05 (Oral)
小無健司、有田裕二、矢板毅、渡辺博道、森本恭一、渡部雅
13. 博士人材向け工学専門教育とヒューマンスキル研修の短期融合プログラムの
開発 …………… 1455
日本工学教育協会第 69 回年次大会・工学教育研究講演会
Online (2021.9.8-10) No.2A16 (Oral)
寺田弥生

14. Cu-Au、Cu-Ni 系の原子サイズに関する理論的考察…………… 1457
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.111 (Oral)
陳迎、堀内寿晃、毛利哲夫
15. Effect of alloying elements on the stability of (Cr, Zr) intermetallic phases …… 1458
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.172 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
16. Thermodynamic stability of X, Y doped $\text{Sm}(\text{Fe}, \text{X})_{12}\text{Y}$ compounds …… 1459
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.176 (Oral)
Arkapol Saengdeejing and Ying Chen
17. ナノ結晶軟磁性体における磁歪効果とエネルギーロス…………… 1460
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.300 (Oral)
塚原宙、今村裕志、三俣千春、鈴木清策、小野寛太
18. CrFeCoNiM (M=Pd, Pt)合金の熱力学的性質の評価…………… 1461
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.S3.3 (Oral)
大谷博司、榎木勝徳
19. クラスター展開法を用いた Cantor 合金の平均二乗原子変位の評価…………… 1462
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.S3.39 (Oral)
榎木勝徳、大谷博司
20. マグネシウム系高水素配位遷移金属錯体水素化物の合成…………… 1463
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.S7.23 (Oral)
高木成幸、高橋和輝、内海伶那、木須一彰、金相侖、折茂慎一

21. コロナ禍における計算材料科学分野の若手研究者支援—事例報告：計算物質科学人材育成コンソーシアムによるセミナー活動…………… 1464
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会
Online (2021.9.14-17) No.S8.12 (Oral)
寺田弥生、川勝年洋、久保百司、高木敏行、陳怡靜
22. 三元合金ナノ粒子 PdRuM (M = Cu, Rh, Ir, Au) の有限温度下での安定性予測…………… 1465
第 128 回触媒討論会
Online (2021.9.15-17) No.A1 講演 3I02 (Oral)
難波優輔、古山通久
23. Tropone 二価カチオン($C_7H_6O^{2+}$)における X 線誘起異性化・解離経路のスピ状態依存性…………… 1466
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.1A07 (Oral)
山崎馨、緑川克美
24. Quantitative determination of Fresnel factor dispersion in the analysis of sum-frequency generation spectroscopy…………… 1468
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.3B14 (Oral)
Lin Wang, Ryo Murata, Ken-ichi Inoue, Shen Ye and Akihiro Morita
25. 電子共鳴を含む SFG 計算の開発とキラル系への応用…………… 1470
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.3B15 (Oral))
細谷毅、王琳、森田明弘
26. Zundel-Eigen Transformation of Hydrated Proton at the Air-Water Interface Revealed by HD-VSFG Spectroscopy and MD Simulation…………… 1472
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4B07 (Oral)
Mohammed Ahmed, Tatsuya Ishiyama, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Akihiro Morita and Tahei Tahara

27. 極端紫外レーザー光電子分光による気液界面の電子状態の研究 …………… 1474
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4B08 (Oral)
山本遥一、石山達也、森田明弘、鈴木俊法
28. 油水界面を反応場とする相間移動触媒反応の反応機構 …………… 1476
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4B09 (Oral)
小泉愛、岸本直樹、高橋英明、森田明弘
29. 極低温クラスターイオン Co_m^+He_n の近赤外光解離分光 — 電子構造のサイズ依存性 …………… 1478
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4C09 (Oral)
尾高英穂、市橋正彦
30. 溶液系界面を対象とするグランドカノニカル分子動力学法の開発 …………… 1480
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.1P083 (Poster)
今泉伊織、平野智倫、内藤暢也、森田明弘
31. 有機溶媒界面のイオン輸送反応における微量の水の触媒効果 …………… 1482
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.2P040 (Poster)
市川怜奈、小泉愛、平野智倫、森田明弘
32. 和周波発生分光における四重極成分の時間依存形式による計算 …………… 1484
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.2P044 (Poster)
平野智倫、森田明弘
33. 疎水性水和殻構造における水の振動スペクトルの理論解析 …………… 1486
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4P081 (Poster)
丸岡俊政、平野智倫、矢澤尚也、森田明弘

34. 振動差スペクトル計算の並列実装による効率化と水/電極表面への応用 … 1488
第 15 回分子科学討論会
Online (2021.9.18-21) No.4P087 (Poster)
矢澤尚也、平野智倫、森田明弘
35. 第一原理計算に基づく遷移金属硫化物 WS_2 の電子状態と超伝導性研究 … 1490
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.20aF1-8 (Oral)
王宇、関川卓也、大野義章、佐野和博
36. Te 系カルコゲナイドの強誘電秩序下で生じる非線形応答の理論 …………… 1491
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.20aH3-1 (Oral)
大岩陸人、楠瀬博明
37. 動的平均場理論によるドーピングされたハバード模型のスピン一重項と三重項の
超伝導感受率 …………… 1492
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.21aH1-6 (Oral)
猪熊祐輔、大野義章
38. 環状鎖・線状鎖混合系の二軸伸長流動下で観察されたストレスオーバーシュート
の分析 …………… 1493
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.23aM2-12 (Oral)
村島隆浩、萩田克美、川勝年洋
39. 環状／線状混合系のブロックコポリマー相分離構造に対する複合的分子シミュ
レーション解析 2 …………… 1494
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.23aM2-13 (Oral)
萩田克美、本田隆、村島隆浩、川勝年洋
40. 疎行列の数値対角化による多体局在転移点の推定 …………… 1495
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.23pL3-10 (Oral)
沓澤太斗、藤堂眞治

41. 第一原理計算を用いた SrTiO₃ の電子状態と超伝導 …………… 1496
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.20pPSH-19 (Poster)
伊海田陸、関川卓也、大野義章、佐野和博
42. 第一原理計算に基づく単層 1T'-WTe₂ の電子状態…………… 1497
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.20pPSH-55 (Poster)
長谷川巧、関川卓也、中村康晴、大野義章
43. SmS における励起子秩序と強誘電転移の理論模型…………… 1498
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.20pPSH-75 (Poster)
高野真一、関川卓也、飯塚優人、大野義章
44. 深層学習を用いたワニエ関数生成器の精度検証…………… 1499
日本物理学会 2021 年秋季大会
Online (2021.9.20-23) No.21pPSL-3 (Poster)
吉見一慶、井戸康太、三澤貴宏、栗田謙亮、及川達希、是常隆
45. 結晶構造制御によるピレン系有機半導体の高移動度化…………… 1500
第 31 回基礎有機化学討論会
Online (2021.9.21-23) No.3A07 (Oral)
瀧宮和男、ブルガレビッチ キリル、堀内信吾、川畑公輔、大垣拓也、
アッバス ママティミン、アブルジズ アブラット
46. チエノ [2,3-*b*]チオフェン構造をもつテトラチエノアセン誘導体の結晶構造と物
性…………… 1501
第 31 回基礎有機化学討論会
Online (2021.9.21-23) No.1 P041 (Poster)
金澤輝石、川畑公輔、Kirill Bulgarevich、瀧宮和男
47. First-principles calculation on the uniaxial-strain-induced change of the adsorption
behavior of gas molecules on graphene…………… 1502
日本機械学会 第 34 回計算力学講演会 (CMD2021)
Online (2021.9.21-23) No.012 (Oral)
Meng Yin, Qinqiang Zhang, Xiangyu Qiao, Ken Suzuki and Hideo Miura

48. ペプトイドナノシートに関する FMO、DPD 計算の試み-#1 1506
第 82 回応用物理学会秋季学術講演会
Online (2021.9.21-23) No.22p-P08-7 (Poster)
望月祐志、奥脇弘次、太刀野雄介、佐久間ゆり奈、塚本暁子、秋澤和輝、
北原駿
49. Theoretical modeling of 2D borophene layers on metal supports 1507
The 7th Hokkaido University Cross-Departmental Symposium
Online (2021.10.1) (Oral)
A. Lyalin and T. Taketsugu
50. 分子性半導体の結晶構造制御 ～高密度共役を目指して～ 1508
日本化学会秋季事業 第 11 回 CSJ 化学フェスタ 2021
Online (2021.10.19-21) No.A1-08 (Oral)
瀧宮和男
51. Co effect in the precipitation behavior in Cu-Ni-Si alloy 1509
日本銅学会：第 61 回講演大会
Online (2021.10.23-24) (Oral)
Eun-Ae Choi, Seung Zeon Han, Jee Hyuk Ahn, Satoshi Semboshi, Jehyun Lee and
Sung Hwan Lim
52. 有機修飾固体／有機溶媒界面の親和性に及ぼす表面修飾鎖および溶媒の影響
..... 1511
第 42 回日本熱物性シンポジウム
Online (2021.10.25-27) No.B131 (Oral)
斎藤高雅、竹林遼、久保正樹、塚田隆夫、庄司衛太、菊川豪太、
Donatas Surblys
53. Long- and short-range vacancy ordering in the carbon-zirconium system 1514
状態図・計算熱力学研究会 第 2 回研究会
Online (2021.11.1) No.6 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen

54. ニューラルネットワークポテンシャルによる Au/Li₃PO₄ 界面近傍での欠陥挙動解析…………… 1515
2021 年日本表面真空学会学術講演会
Online (2021.11.3-5) No.1Cp10R (Oral)
清水康司、安藤康伸、南谷英美、渡邊聡
55. The influence of binder on melting process and quality in a laser deposition process using metal paste…………… 1516
粉体粉末冶金協会 2021 年度秋季大会 (第 128 回講演大会)
Online (2021.11.9-11) No.7-6A (Oral)
Weicheng Heng, Kenta Aoyagi and Akihiko Chiba
56. A Theoretical Study on Strain-Induced Change of Schottky Energy Barrier of Dumbbell-Shape Graphene-Nanoribbon for Highly Sensitive Strain Sensors…………… 1517
電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会 (SDM)
Online (2021.11.11-12) (Invited)
Qinqiang Zhang, Ken Suzuki and Hideo Miura
57. 伸長流動の粗視化分子動力学シミュレーション…………… 1523
プラスチック成形加工学会第 29 回秋季大会
Online (2021.11.30-12.1) No.B-212 (Oral)
村島隆浩
58. アセンジカルコゲノフェンジオン骨格を有するドナーアクセプター型有機半導体の構造と物性…………… 1525
第 48 回有機典型元素化学討論会
Online (2021.12.1-3) No.OA-10 (Oral)
川畑公輔、瀧宮和男
59. 分子動力学法による塩化物系フラックス熔融塩の高温物性解析…………… 1526
第 15 回日本フラックス成長研究会
Online (2021.12.2-3) No.10A11 (Oral)
椎葉寛将、手嶋勝弥

60. 環状鎖・線状鎖混合系の二軸伸長流動シミュレーション…………… 1527
2021 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会合同討論会
Online (2021.12.8-9) No.5 (Oral)
村島隆浩、萩田克美、川勝年洋
61. Attempts towards databasing first-principles calculations of alloy nanoparticles · 1529
第 31 回日本 MRS 年次大会
Online (2021.12.13-15) No.D-P14-006 (Poster)
難波優輔、石澤雅司、古山通久

<2022 年>

1. 赤外テラヘルツ分光による弱いファンデルワールス力の研究…………… 1530
第 35 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (JSR2022)
Online (2022.1.7-9) No.9B301I (Invited)
高橋まさえ

2. Vacancy ordering in zirconium carbide …………… 1531
第 60 回セラミックス基礎科学討論会
Online (2022.1.8-9) No.1G14 (Invited)
Theresa Davey and Ying Chen

3. Honeycomb Borophene: myth or reality?…………… 1532
PCoMS Symposium & Annual meeting of Supercomputing Consortium for
Computational Materials Science 2021
Online (2022.2.14-15) (Oral)
A. Lyalin and T. Taketsugu

4. 階層的動力学理論による有機分子のフェムト秒 X 線光化学…………… 1533
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 2021
Online (2022.2.14-15) (Oral)
山崎馨

5. Mo-Ti-C 三元系における TiC の非化学量論性に伴う弾性率変化…………… 1534
日本セラミックス協会 2022 年年会
Online (2022.3.10-12) No.3A25 (Oral)
井田駿太郎、星崎航太郎、金子昂弘、南茜、関戸信彰、吉見享祐

6. M-Ti-C 三元系 MX セラミックスの非化学量論性と弾性率に関する第一原理計
算…………… 1535
日本セラミックス協会 2022 年年会
Online (2022.3.10-12) No.1P1-005 (Poster)
星崎航太郎、金子昂弘、井田駿太郎、吉見享祐

7. First Principles Analysis on the Strain-induced Change of Adsorption Behaviour of Gas Molecules on Graphene 1536
日本機械学会東北支部 第 57 期総会・講演会
Online (2022.3.11) No.120 (Oral)
Meng Yin, Xiangyu Qiao, Qinqiang Zhang, Ken Suzuki and Hideo Miura
8. Effect of doping elements on the stability and volume of the C15 Laves phase $ZrCr_2$ 1538
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.57 (Oral)
Theresa Davey and Ying Chen
9. Cu-Au、Cu-Ni 固溶体の原子サイズ・格子緩和に関する理論的考察 1539
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.61 (Oral)
陳迎、堀内寿晃、毛利哲夫
10. ナノ結晶軟磁性体における磁歪効果の結晶粒径依存性 1540
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.269 (Oral)
塚原宙、今村裕志、三俣千春、鈴木清策、小野寛太
11. 磁歪による異常渦損の周波数依存性 1541
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.270 (Oral)
塚原宙、今村裕志、三俣千春、鈴木清策、小野寛太
12. 計算物質科学専門教育とヒューマンスキル研修の融合プログラムの開発 1542
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.281 (Oral)
寺田弥生
13. 第一原理引張試験を用いたアルミニウム対称傾角粒界の粒界弾性率の評価 1543
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.348 (Oral)
白坂仁、連川貞弘

14. Prediction of stable solid solution of transition metal ternaries by first-principles calculation and machine learning 1544
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.S2.4 (Oral)
Tran Nguyen-Dung, Cheng Liu and Ying Chen
15. ハイエントロピー合金の強度に及ぼす因子の熱力学的検討 1545
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.S2.5 (Oral)
大谷博司、榎木勝徳
16. SmFe₁₂系と Sm₂Fe₁₇系化合物の第一原理熱力学及び安定性の比較 1546
日本金属学会 2022 年春期(第 170 回)講演大会
Online (2022.3.15-17) No.S7.18 (Oral)
陳迎、Arkapol Saengdeejing
17. B1 型 TiC の非化学量論性に伴う物性変化 1547
日本鉄鋼協会第 183 回春季講演大会
Online (2022.3.15-17) (Oral)
井田駿太郎、星崎航太郎、金子昂弘、南茜、関戸信彰、吉見享祐
18. 空間反転対称性のない系が示す風変わりな物性応答 1548
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.19pS11-2 (Invited)
楠瀬博明
19. 自発的対称性の破れに伴う $O(N)$ 模型の臨界指数の非対称性 1550
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15aB12-6 (Oral)
桐越研光、北孝文
20. 有効 196 軌道模型に基づく PrT₂Al₂₀(T=Ti, V) の多極子揺らぎと超伝導 II 1551
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15aGB32-7 (Oral)
飯塚優人、山田武見、半澤克郎、大野義章

21. 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 II 1552
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15pE28-10 (Oral)
齋藤雅樹、関川卓也、大野義章
22. 第一原理経路積分動力学法による高圧下水素化合物超伝導体の研究 1553
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15pGB41-10 (Oral)
渡部友太、野本拓也、有田亮太郎
23. タングステンブロンズ A_xWO_3 に対する 3 軌道ハバード・ホルスタイン模型の
超伝導相図 1554
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.16aGB41-8 (Oral)
関川卓也、大野義章
24. 22 バンド d-p 模型に基づく遷移金属硫化物 WS_2 の電子状態と超伝導 1555
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.16pGB41-9 (Oral)
王宇、関川卓也、大野義章、佐野和博
25. クラスタパルス合流衝突による極低温クラスター複合体 $Co_m^+He_n$ の生成機構
..... 1556
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.17aE26-5 (Oral)
尾高英穂、市橋正彦
26. カイラル結晶における電場・回転場応答の微視的理論 1557
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.17aGB32-1 (Oral)
大岩陸人、楠瀬博明
27. 鉄系超伝導体 111 系と同じ構造をもつ新規超伝導体 LaCoSi の第一原理計算
..... 1558
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15pPSH-12 (Poster)
川井弘之、飯塚優人、大野義章、佐野和博

28. 22 バンド $d-p$ 模型に基づく単層 $1T'-WTe_2$ の電子状態と励起子秩序…………… 1559
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.15pPSH-35 (Poster)
長谷川巧、関川卓也、中村康晴、大野義章
29. 13 バンド $f-d-s$ 模型に基づく SmS の励起子秩序と強誘電転移…………… 1560
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.16pPSH-76 (Poster)
高野真一、飯塚優人、関川卓也、大野義章
30. Wannier 関数を用いた CPA 計算の実装…………… 1561
日本物理学会第 77 回年次大会
Online (2022.3.15-19) No.17pPSL-13 (Poster)
伊東直洋、野本拓也、小林浩二、Sergiy Mankovsky、野村健太郎、
有田亮太郎、Hubert Ebert、是常隆
31. 有機修飾無機ナノ粒子を含む有機溶媒の表面張力測定及び固液間界面親和性の評価…………… 1562
化学工学会第 87 年会
Online (2022.3.16-18) No.PD327 (Poster)
小西徹、斎藤高雅、久保正樹、塚田隆夫
32. ペプトイドナノシートに関する FMO、DPD 計算の試み-#2…………… 1563
第 69 回応用物理学会春季学術講演会
Online (2022.3.22-26) No.23p-E104-4 (Oral)
太刀野雄介、秋澤和輝、奥脇弘次、望月祐志
33. 第一原理計算に基づく表面高温超伝導の候補物質 A_xWO_3 表面の電子状態…………… 1564
第 69 回応用物理学会春季学術講演会
Online (2022.3.22-26) No.22a-P05-4 (Poster)
関川卓也、川井弘之、大野義章

34. 脱酸素脱水反応における $\text{MoO}_x\text{H}_y/\text{TiO}_2$ 触媒の構造および反応機構に関する理論的研究 …………… 1565
第 129 回触媒討論会
Online (2022.3.28-30) No.P11 (Poster)
朝田大生、池田龍志、村岡恒輝、中川善直、富重圭一、中山哲
35. $\text{Mo}_x@Rh$, $\text{ReO}_x@Rh$, $\text{ReO}_x@Ir$ 触媒による水素化分解反応の理論的解明 …… 1566
第 129 回触媒討論会
Online (2022.3.28-30) No.P12 (Poster)
横尾陸、池田龍志、村岡恒輝、中川善直、富重圭一、中山哲

VI. 学位取得

<博士>

1. Study on Phase Transformations of Manganese Dioxide Polymorphs Towards Energy Storage Applications
東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻
畠山拓也
2. Simulação das transformações nucleadas em contornos anisotrópicos
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Gabriella Maria Silveira de Sá

<修士>

1. ミクロな回転自由度を考慮した拡張弾性論の群論的考察
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
中村思裕
2. タイトバインディングモデルの自動構築と Mn_3Sn における異常 Hall 効果の解析
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
新藤亮
3. 半導体における超伝導転移の理論
明治大学大学院理工学研究科物理学専攻
青山美幸
4. 水和体結晶の構造と振動吸収スペクトル特性
東北大学大学院農学研究科食品機能健康科学講座テラヘルツ生物工学分野
小和田光瑠
5. 生体適合性モノマーの振動吸収スペクトルと溶媒効果
東北大学大学院農学研究科食品機能健康科学講座テラヘルツ生物工学分野
陳思樊
6. オリゴエチレンオキシド鎖を導入した BTBT 系有機半導体の結晶構造と物性
東北大学大学院理学研究科化学専攻
今井太一
7. テトラチエノアセンの結晶構造と輸送特性に対する構造異性の効果
東北大学大学院理学研究科化学専攻
金澤輝石
8. チオフェン縮環ナフタレンイミドを基盤とする近赤外有機半導体の開発
東北大学大学院理学研究科化学専攻
高田歩

9. Simulação Computacional de Transformações de fase ocorridas em aço inox duplex
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Ana Gabriella Conceição Dos Santos

10. Reconstrução Microestrutural 2d e 3d de Ferro Fundido Nodular pelo Método de Yeong-Torquato
Universidade Federal Fluminense, Brazil
Caio Costa Abrantes Ferreira

11. 機械学習による界面熱電物性の定量的予測
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
Lortaraprasert Chayaphol

12. 金属・絶縁体界面における電子・フォノン非平衡性を利用した熱輸送制御
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
Kim Kyoungjung

Ⅶ. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員…………… 1567
2. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 1568
3. スーパーコンピューターシステム関連 レイアウト図…………… 1569