

2000 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

(2000 年 4 月～2001 年 3 月)

目次

はじめに

I. 研究内容概要

1. Theoretical Study for Polyphenyl Based Molecular Electronic Devices..... 1
IMR, Tohoku University C. Majumder, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
2. Molecular Dynamics Simulation of Temperature Dependence of Dislocation Behavior in fcc Ni Single Crystal..... 3
Department of Mechanical System Engineering, Gunma University T. Aihara
IMR, Tohoku University R. Kaneko, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe
3. Transport Properties Studies on Molecular Electronic Devices..... 5
IMR, Tohoku University J. Q. Lu, J. Wu, H. Chen, H. Mizuseki
and Y. Kawazoe
4. First Principles Study of the Growth of CdSe Clusters..... 6
IMR, Tohoku University V. Sundararajan, V. Kumar and Y. Kawazoe
Centre for Interdisciplinary Research, Tohoku University Y. Barnakov,
I. Dmitruk and A. Kasuya
5. 第一原理による Ca と Sr における fcc-bcc 相転移の研究..... 8
東北大学金属材料研究所 吉田一徳、M. Sluiter、川添良幸
6. First-principles Studies on Magic Clusters..... 10
IMR, Tohoku University Q. Wang, Q. Sun, J-Z. Yu and Y. Kawazoe
7. 全電子混合基底法による Ni₆ 遷移金属マイクロクラスターの
第一原理分子動力学計算..... 11
東北大学金属材料研究所 志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸

8. Electronic Properties of Carbon Onions..... 13
IMR, Tohoku University K. Esfarjani and Y. Kawazoe
Hitachi Tohoku Software Y. Hashi
9. Numerical Study on Optimal Condition of Fluoride Crystal Growth in
Czochralski Technique..... 14
IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Simamura,
Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
10. Electron Transport in Molecular Electronic Devices..... 16
IMR, Tohoku University J. Wu, J. Q. Lu, H. Chen, H. Mizuseki
and Y. Kawazoe
11. Ni ならび Ni₃Al の転位速度の温度依存性に関する分子動力的研究... 17
東北大学金属材料研究所 金子竜太、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸
群馬大学工学部 相原智康
12. 繰り込みポテンシャルを用いた BCC 格子モデルによる Si 凝固の検討..... 18
東北大学工学部 佐原亮二、久保紘
東北大学金属材料研究所 水関博志、川添良幸
横浜国立大学工学部 大野かおる
13. Analysis of C₆₀ Insertion into Single Wall Carbon Nanotube by Molecular
Dynamics Simulation..... 20
IMR, Tohoku University Takafumi Ishii, Keivan Esfarjani
and Yoshiyuki Kawazoe
Hitachi Tohoku Software Yuichi Hashi
JST-ICORP Nanotubelite Project, c/o NEC Corporation Sumio Iijima
14. Report of *Ab Initio* Studies on Magic Clusters..... 24
IMR, Tohoku University Q. Sun, Q. Wang, J-Z. Yu and Y. Kawazoe

15. 全電子混合基底法による第一原理計算..... 25
横浜国立大学 大野かおる
東北大学金属材料研究所 志賀圭一郎、石井聡、森里嗣生、
Marcel Sluiter、川添良幸
北京清華大学 Jian Wu
日立東北ソフトウェア 安達均
16. Electronic and Atomic Structure of Cluster Based Materials..... 28
IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
17. BCC 合金中の転位と点欠陥の相互作用に関する
コンピュータ・シミュレーション..... 30
青森公立大学 神山博
東北大学金属材料研究所 川添良幸、松井秀樹
18. Effect of Hydrostatic Pressure on Single Wall Carbon Nanotube Bundles... 32
IMR, Tohoku University M. H. F. Sluiter, V. Kumar and Y. Kawazoe
19. Approach to the Real Molecular Logic Devices..... 34
IMR, Tohoku University J. Q. Lu, H. Chen, J. Wu, H. Mizuseki
and Y. Kawazoe
20. Thermodynamic Stability of GaAs/InAs Heterostructure..... 35
IMR, Tohoku University Sornthep Vannarat, Marcel Sluiter
and Yoshiyuki Kawazoe
21. 複雑系の統合シミュレーション(アクティブ原子配線網シミュレータ)
に関する研究..... 38
東北大学金属材料研究所 水関博志、Chiranjib Majumder、 Hao Chen、
Jian Wu、Keivan Esfarjani、西松毅、Vijay Kumar、川添良幸
22. 第一原理計算によるアルミニウムクラスターと水素の相互作用の解析..... 40
東北大学金属材料研究所 川村博昭、Vijay Kumar、Qiang Sun、川添良幸
23. クラスター堆積法による薄膜成長過程に関するシミュレーション..... 42
東北大学金属材料研究所 本郷研太、水関博志、川添良幸

24. 第一原理計算による次世代リソグラフィ技術用硝材の探索..... 45
東北大学金属材料研究所 寺久保憲昭、西松毅、水関博志、川添良幸、
Dorota A. Pawlak、島村清史、福田承生
25. Exchange Interaction and Magnetic Phase Transition in Layered Fe/Au(001)
Superlattices..... 47
IMR, Tohoku University Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
Institute of Physics, Chinese Academy of Science Ding-Sheng Wang
26. 第一原理計算による Ne 原子と炭素クラスターの高速衝突についての
研究..... 49
東北大学金属材料研究所 森里嗣生、川添良幸
横浜国立大学 大野かおる
27. Estimation of Second and Third Virial Coefficient of Lattice Polymer with
Various Topology..... 51
IMR, Tohoku University Kazuhito Shida and Yoshiyuki Kawazoe
Yokohama National University Kaoru Ohno
28. 全電子混合基底法によるバナジウムクラスターの構造最適化計算..... 53
(株)コーデック 裴栄造、長内弘喜
横浜国立大学 大野かおる
東北大学金属材料研究所 Marcel Sluiter、川添良幸
29. Lattice Dynamics Simulations of Clathrate Compounds..... 55
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, N. D. Luzhkovskaya
and Y. Kawazoe
Institute of Inorganic Chemistry V. R. Belosludov, V. P. Shpakov,
T. M. Inerbaev
Steacie Institute for Molecular Sciences J. S. Tse
30. 第一原理計算 GW 近似によるカリウムクラスターの
準粒子エネルギー計算..... 57
東北大学金属材料研究所 石井聡、川添良幸
横浜国立大学 大野かおる

31. マンガン酸化物における軌道励起と共鳴非弾性 X 線散乱..... 59
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 石原純夫
東北大学金属材料研究所 近藤浩、前川禎通
32. コバルト酸化物の熱起電力..... 61
東北大学金属材料研究所 小椎八重航、筒井健二、前川禎通
33. ペロフスカイト型 Mn 酸化物における軌道の自由度と共鳴非弾性
X 線散乱の理論..... 63
東北大学金属材料研究所 近藤浩、前川禎通
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 石原純夫
34. 銅酸化物高温超伝導体のストライプにおける非磁性不純物効果..... 64
東北大学金属材料研究所 高橋亮、遠山貴己、前川禎通
35. First-Principles Studies on Pd Intercalated Graphite..... 65
IMR, Tohoku University Q. Sun, Q. Wang, Y. Kawazoe
Institute of Physics, Chinese Academia Sinica D. S. Wang
Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University T. Oku

II. 原著論文

<1999 年>

1. Numerical Simulation of Convection Depth in Shear Cell under Microgravity..... 67
Adv. Space Res., 24[10] (1999) pp.1321-1324
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki, Kazuyuki Higashino and Yoshiyuki Kawazoe
2. The Effect of Segregation and Partial Order on the Thermodynamics of (111) Antiphase Boundaries in Ni₃Al..... 71
Comput. Mater. Sci., 14 (1999) pp.283-290
Marcel Sluiter, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
3. Weak Universality of a Site-Percolation Model with Two Different Sizes of Particles on a Square Lattice..... 79
J. Phys. Soc. Jpn., 68[12] (1999) pp.3755-3758
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
4. Atomic Structure of Pd-intercalated Graphite by High-Resolution Electron Microscopy and First Principles Calculations..... 83
Mater Trans., JIM, 40[11] (1999.11) pp.1213-1218
T. Oku, Q. Sun, D. S. Wang, Q. Wang, Y. Kawazoe, G. Schmid and K. Suganuma
5. Preferential Formation of Fe₁₃O₈ Clusters in a Reactive Laser Vaporization Cluster Source..... 89
J. Phys. Soc. Jpn., 68[11] (1999.11) pp.3497-3499
M. Sakurai, K. Sumiyama, Q. Sun and Y. Kawazoe
6. Lattice Relaxation of Monosize CeO_{2-x} Nanocrystalline Particles..... 92
Appl. Surf. Sci., 152[1-2] (1999.11) pp.53-56
S. Tsunekawa, R. Sahara, Y. Kawazoe and K. Ishikawa
7. Modelling of Phase Transitions by First-Principle Methods..... 96
Phase Transitions, 65[1-4] (1999.11) pp.73-77
K. Parlinski and Y. Kawazoe

8. Torsional Structure in Poly (Para-Phenylene Vinylene) 101
Synth. Met., 101[1-3] (1999.5) pp.304-305
R. T. Fu, M. Sluiter, C. Q. Wu, X. Sun and Y. Kawazoe
9. Fourier Transform Infrared and Mass Spectrometry Studies of a Photoirradiated
KxC₆₀ Film 103
Eur. Phys. J., D 9[1-4] (1999.12) pp.363-367
J. Onoe, Y. Hashi, K. Esfarjani, Y. Kawazoe and K. Takeuchi
10. Effects of Complexing Agent on the Morphology and Porosity of Electroless
Nickel Deposits 108
Trans. IMF, 77[5] (1999) pp.181-184
Ying Jin, Dongbai Sun, Jing-Zhi Yu and Dejun Yang

<2000 年>

1. Silicon Doped Icosahedral, Cuboctahedral, and Decahedral Cluster
of Aluminum 112
Phys. Rev. B, 61[12] (2000) pp.8541-8547
Vijay Kumar, Satadeep Bhattacharjee and Yoshiyuki Kawazoe
2. First-Principles Studies on the Intrinsic Stability of the Magic
Fe₁₃O₈ Cluster 119
Phys. Rev. B, 61[8] (2000) pp.5781-5785
Qiang Sun, Qian Wang, Parlinski Krzysztof, Jing-Zhi Yu, Yuichi Hashi,
Xing Gao Gong and Yoshiyuki Kawazoe
3. A New Crystal Growth Model Based on a Stochastic Method under an
External Field 124
Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 8 (2000) pp.1-11
Hiroshi Mizuseki, Kazumi Tanaka, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
4. Electric-Field Effects on Electronic Tunneling Transport in Magnetic
Barrier Structures 135
Phys. Rev. B, 61[3] (2000) pp.1782-1731
Yong Guo, Hao Wang, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe

5. Structure of Pb-Intercalated Graphite Onions Formed by Electron Beam Irradiation 139
Mol. Cryst. and Liq. Cryst., 340 (2000) pp.95-100
Takeo Oku, Gunter Schmid, Katsuaki Suganuma, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe

6. Exchange Interaction and Magnetic Phase Transition in Layered Fe/Au(001) Superlattices 145
Phys. Rev. B, 62[5] (2000) pp.3354-3360
Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

7. Ground State Structures of Neutral and Charged Ti Clusters Containing 2 to 16 Atoms 152
Mater. Trans. JIM, 41[5] (2000) pp.635-638
Akito Taneda and Yoshiyuki Kawazoe

8. Spin-Dependent Electronic States and Magnetoconductance in a Magnetic Quantum Antidot 156
J. Phys.: Condens. Matter, 12 (2000) pp.3359-3367
Yong Guo, Bin Wang, Hui Hu, Jing-Zhi Yu, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe

9. Study on Local Structures of C_xN_{1-x} Films by First-Principles 1s Orbital Energy Calculations 165
Mater. Trans. JIM, 41[5] (2000) pp.628-630
Tsuguo Morisato, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Isao Kusunoki

10. Prediction of Solution Enthalpies of Substitutional Impurities in Aluminium 168
Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 8 (2000) pp.221-232
Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

11. Electron-Spin Polarization in Magnetically Modulated Quantum Structure 180
Phys. Rev. B, 62[4] (2000) pp.2635-2639
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Zhong Zeng, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe

12. Simulation of Electrochemical Deposition Process by
a Multiparticle Diffusive Aggregation Model..... 185
J. Appl. Phys., 87[9] (2000) pp.4611-4616
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

13. Monte Carlo Analysis of the Osmotic Pressure of Athermal
Polymer Solutions in Dilute and Semi-dilute Regimes..... 191
Computational and Theoretical Polymer Science, 10 (2000) pp.281-285
Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Masayuki Kimura and Yoshiyuki Kawazoe

14. Effect of Magnetic Transition on Hydrogen Solubility in Ni..... 196
Mater. Trans. JIM, 41[5] (2000) pp.621-623
Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Utako Onose, Yoko Akiyama
and Yoshiyuki Kawazoe

15. *Ab Initio*-Monte Carlo Studies on the Finite-Temperature
Properties of L₁₀ FeAu Superlattice..... 199
Mater. Trans. JIM, 41[5] (2000) pp.601-604
Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

16. In Situ FTIR, XPS, and STM Studies of the Nano-Structure
of a Photopolymerized C₆₀ Film..... 203
Mol. Cryst. and Liq. Cryst., 340 (2000) pp.689-694
Jun Onoe, Tomonobu Nakayama, Aiko Nakao, Yuichi Hashi,
Keivan Esfarjani, Yoshiyuki Kawazoe, Masakazu Aono and Kazuo Takeuchi

17. Coherent Transport through Carbon Nanotubes with Finite Length..... 209
Mater. Trans. JIM, 41[5] (2000) pp.571-573
Jian Wu, Bing-Lin Gu, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe

18. A Modified CCA Model Describing Gelation Processes..... 212
Computational and Theoretical Polymer Science, 10 (2000) pp.269-274
Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

19. First-Principles Studies on Magnetism of Ni Clusters Coated and Alloyed with Pd..... 218
 Phys. Lett. A, 267 (2000) pp.394-402
 Qian Wang, Qiang Sun, Jing-Zhi Yu, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
20. Ab Initio Molecular Dynamics Simulation for the Insertion Process of Si and Ca Atoms into C₇₄..... 227
 Mater. Sci. Eng., A, 290 (2000) pp.6-10
 Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Yutaka Maruyama, Takaichi Hirata, Rikizo Hatakeyama and Noriyoshi Sato
21. First-Principles Studies on Pb Intercalated Graphite..... 232
 Mol. Cryst. and Liq. Cryst., 340 (2000) pp.283-288
 Qiang Sun, Ding Sheng Wang, Qian Wang, Takeo Oku and Yoshiyuki Kawazoe
22. Ab Initio Study of Phonons and Structural Stabilities of the Perovskite-Type MgSiO₃..... 238
 Eur. Phys. J. B, 16 (2000) pp.49-58
 Krzysztof Parlinski and Yoshiyuki Kawazoe
23. *Ab Initio* Study of Phonons in the Rutile Structure of SnO₂ under Pressure..... 248
 Eur. Phys. J. B, 13 (2000) pp.679-683
 Krzysztof Parlinski and Yoshiyuki Kawazoe
24. Mechanical Stability of Gas Hydrates under Pressure..... 253
 Annals of the New York Academy of Sciences, 912 (2000) pp.993-1002
 Vladimir Romanovich Belosludov, Vladimir Petrovich Shpakov, John S. Tse, Rodion Vladimirovich Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
25. Structures of Magic Ba Clusters and Magic Ba Suboxide Clusters..... 263
 Phys. Rev. A, 62[6] (2000) pp.632031-632036
 Qian Wang, Qiang Sun, Jing Zhi Yu, Bing Lin Gu, Yoshiyuki Kawazoe and Hashi Yuichi

26. Monte Carlo Study of the Second Virial Coefficient and Statistical Exponent of Star Polymers with Large Numbers of Branches ····· 269
 Macromolecules, 33[20] (2000) pp.7655-7662
 Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Masayuki Kimura and Yoshiyuki Kawazoe
27. Geometry and Electronic Structures of Magic Transition-Metal Oxide Clusters M_9O_6 ($M=Fe, Co, \text{ and } Ni$) ····· 277
 Phys. Rev. B, 62[12] (2000) pp.8500-8507
 Qiang Sun, Masaki Sakurai, Qian Wang, Jing Zhi Yu, Guang Hou Wang, Kenji Sumiyama and Kawazoe Yoshiyuki
28. Finite Size Effects in Carbon Nanotubes ····· 285
 Appl. Phys. Lett., 77[16] (2000) pp.2554-2556
 Jian Wu, Wenhui Duan, Bing- Lin Gu, Jing- Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
29. First-Principles Calculation on Dissociation of Hydrogen Molecule in Nickel ····· 288
 Mater. Trans. JIM, 41[9] (2000) pp.1114-1117
 Jing Zhi Yu, Qiang Sun, Qian Wang, Utako Onose, Yoko Akiyama and Yoshiyuki Kawazoe
30. Spin-Polarized Transport Through a $ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe$ Heterostructure under an Applied Electric Field ····· 292
 J. Appl. Phys., 88[11] (2000) pp.6614-6617
 Yong Guo, Hao Wang, Bing- Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
31. Tunneling Transport of Two-Dimensional Spin-Polarized Electrons ····· 296
 Through Magnetic Quantum Structures (in Chinese)
 Acta Phys. Sin., 49[9] (2000) pp.1814-1820
 Yong Guo, Bing Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
32. Electron Coherent Tunneling in Low-Dimensional Magnetic Quantum Structures ····· 303
 Physica, E8 (2000) pp.146-153
 Yong Guo, Hao Wang, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe

33. Origin of the Blue Shift in Ultraviolet Absorption Spectra of Nanocrystalline CeO_{2-x} Particles..... 311
Mater. Trans. JIM, 41[8] (2000) pp.1104-1107
Shin Tsunekawa, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Atsuo Kasuya
34. Systematic Study of Foreign-Atom-Doped Fullerenes by Using a Nuclear Recoil Method and Their MD Simulation..... 315
J. Chem. Phys., 112[6] (2000) pp.2834-2842
T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga and Y. Kawazoe, Y. Maruyama and K. Masumoto
35. Theoretical Insights into Fullerenes Adsorbed on Surfaces: Comparison with STM Studies..... 324
Advances in Scanning Probe Microscopy, PG (2000) pp.113-142
Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
36. Coulomb Expansion of a Van der Waals C_{60} Solid Film..... 354
Sci. China Ser., A 43[11] (2000) pp.1224-1232
Q. K. Xue, J. L. Li, M. Sun, H. Lu, T. Hashizume, Y. Hasegawa, K. Ohno, Z. Q. Li, Y. Kawazoe, T. Sakurai, H. Kamiyama and H. Shinohara
37. Origin of Anomalous Lattice Expansion in Oxide Nanoparticles..... 363
Phys. Rev. Lett., 85[16] (2000) pp.3440-3443
S. Tsunekawa, K. Ishikawa, Z-Q. Li, Y. Kawazoe and A. Kasuya
38. Critical Size and Anomalous Lattice Expansion in Nanocrystalline BaTiO_3 Particles..... 367
Phys. Rev. B, 62[5] (2000) pp.3065-3070
S. Tsunekawa, S. Ito, T. Mori, K. Ishikawa, Z-Q. Li and Y. Kawazoe
39. Growth Processes of Magnetic Clusters Studied by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 373
J. Appl. Phys., 87[9] (2000) pp.6561-6563 Part 3
Hiroshi Mizuseki, Yoing Jin, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille

40. Positron Confinement in Ultrafine Embedded Particles:Quantum-Dot-Like State in an Fe-Cu Alloy..... 376
 Phys. Rev. B, 61[10] (2000) pp.6574-6578
 Y. Nagai, M. Hasegawa, Z. Tang and A. Hempel, K. Yubuta, T. Shimamura, Y. Kawazoe, A. Kawai and F. Kano
41. *Ab Initio* Study of Transitory Metastable Phases Solidified by Drop-Tube Processing..... 381
 Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 8 (2000) pp.233-237
 Cecile Berne, Alain Pasturel, Marcel Sluiter and Bernard Vinet
42. X-ray Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Molecular-Dynamics Studies of an Air-Exposed C₆₀ Film..... 386
 Trans. Mat. Soc. J., 25[4] (2000) pp.1011-1014
 Jun Onoe, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Takeuchi
43. Theory of Orbital Excitation and Resonant Inelastic X-ray Scattering in Manganites..... 390
 Phys. Rev. B, 62[4] (2000) pp.2338-2345
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa
44. Orbital Ordering and Resonant X-ray Scattering in Layered Manganites..... 398
 Phys. Rev. B, 62[9] (2000) pp.5690-5695
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa
45. Thermopower in Cobalt Oxides..... 404
 Phys. Rev. B, 62[11] (2000) pp.6869-6872
 W. Koshibae, K. Tsutusi and S. Maekawa
46. Theory of Orbital Ordering, Fluctuation, and Resonant X-ray Scattering in Manganites..... 408
 Phys. Rev. B, 62[14] (2000) pp.R9252-R9255
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa

<2001 年>

1. How Well Can Physical, Chemical, and Mechanical Properties of Materials be Predicted by *Ab Initio* Techniques? 412
Materials and Design, 22 (2001) pp.61-67
Yoshiyuki Kawazoe
2. *Ab Initio* Studies of Phonons in CaTiO₃ 419
J. Chem. Phys., 114[5] (2001) pp.2395-2400
K. Parlinski, Y. Kawazoe and Y. Waseda
3. Evolution of Electronic States and Abnormal Multishell Relaxations in Strontium Clusters 425
Phys. Rev. B, 63 (2001) pp.754101-754109
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
4. First-Principles Studies on Pure and Doped C₃₂ Clusters 434
J. Phys.:Cond. Mat., 13 (2001) pp.1931-1938
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, K Ohno and Y Kawazoe
5. *Ab Initio* GW Quasiparticle Energies of Small Sodium Clusters by an All-Electron Mixed-Basis Approach 442
Phys. Rev. B, 63[15] (2001) pp.1551041-1551046
Soh Ishii, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Steven G Louie
6. A Monte Carlo Simulation on the Process of Cluster Deposition 448
Mater. Trans., 42[3] (2001) pp.439-442
Kenta Hongo, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
7. Molecular Dynamics Simulation of Temperature Dependence of Dislocation Behavior in fcc Ni Single Crystal under Tensile Condition 452
Mater. Trans., 42[3] (2001) pp.425-428
Tomoyasu Aihara, Ryota Kaneko, Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

8. Real-Space Representation of Electron Localization and Shell Structure
in Jelliumlike Clusters..... 456
Phys. Rev. B, 63[19] (2001) pp.1934081-1934084
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, V. Kumar and Y. Kawazoe

9. Strain Dependence of Solute Atom Energy in Aluminum-Rich Alloys..... 460
Mater. Trans., 42[3] (2001) pp.429-431
Sornthep Vannarat, Marcel Henricus Franciscus Sluiter
and Yoshiyuki Kawazoe

10. Nonmetal-Metal Transition in Ban Clusters..... 463
Solid State Commun., 117 (2001) pp.635-639
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu and Y. Kawazoe

11. Icosahedral Growth and Non-Metal-Metal Transition in
Strontium Clusters..... 468
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1949-1953
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

12. Spin-Resonant Suppression and Enhancement in ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe
Multilayer Heterostructures..... 473
Phys. Rev. B, 63[21] (2001) pp.2144151-2144156
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Hao Wang and Yoshiyuki Kawazoe

13. Quantum Size Effect and Temperature Effect on Spin-Polarized Transport
in ZnSe/ Zn_{1-x}Mn_xSe Multilayers..... 479
Phys. Lett. A, 284 (2001) pp.205-215
Yong Guo, Jun-Qiang Lu, Zhong Zeng, Qian Wang, Bing-Lin Gu
and Yoshiyuki Kawazoe

14. Why the All-Electron Full-Potential Approach is Suitable for
Calculations on Fullerenes and Nanotubes? 490
J. Molecular Graphics and Modelling, 19 (2001) pp.270-273
Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno, Keivan Esfarjani, Yutaka Maruyama,
Keiichirou Shiga and Amir Abbas Farajian

15. *Ab-Initio* Quasiparticle Energies of Small Sodium Clusters by the GW Approximation..... 496
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1963-1966
S. Ishii, K. Ohno and Y. Kawazoe

16. Multiscale Simulation of Cluster Growth and Deposition Processes by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 500
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1911-1914
H. Mizuseki, K. Hongo, Y. Kawazoe and L. T. Wille

17. Hund's Rule in Metal Clusters: Prediction of High Magnetic Moment State of $Al_{12}Cu$ From First-Principles Calculations..... 504
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.1154051-1154055
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

III. 国際会議発表論文

<2000年>

1. Orbital Correlation Effects to Very Small Transition Metal Microclusters • 509
The Symposium on Strongly Correlated Electron Systems, Recife, Brazil
(2000.8.6-11) p.52
Lei Zhou, Jian-Tao Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Ding-Sheng Wang

2. Role of Orbital Correlation in Magnetocrystalline Anisotropy and Orbital Polarization in Transition Metal Thin Films ••••• 510
The Symposium on Strongly Correlated Electron Systems, Recife, Brazil
(2000.8.6-11) p.312
Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe, Ding-Sheng Wang and PingSheng

3. Exchange Interaction and Magnetic Phase Transition In Layered Fe/Au Superlattices ••••• 511
The Symposium on Strongly Correlated Electron Systems, Recife, Brazil
(2000.8.6-11) p.321
Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe and Ding- Sheng Wang

4. New Materials Formation in Carbon Clusters by Using Nuclear Recoil Method ••••• 512
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan
(2000.8.20-25) p.67
T. Ohtsuki, J. Kasagi, K. Ohno, K. Shiga and Y. Kawazoe

5. Abnormal Intermolecular Interaction between Overlayer C₆₀ Molecules Due to Induced Dipole Moments in C₆₀ Thin Films Adsorbed on Substrates ••••• 513
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan
(2000.8.20-25) p.170
Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

6. Formation of N-doped C₆₀ ••••• 514
Fifth International Conference on Nanostructured Materials Sendai, Japan
(2000.8.20-25) p.172
Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Tsutomu Ohtsuki

7. Multiscale Simulation of Cluster Growth and Deposition Processes by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 515
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan (2000.8.20-25) p.209
Hiroshi Mizuseki, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille

8. Icosahedral Growth and Non-Metal-Metal Transition in Strontium Clusters..... 516
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan (2000.8.20-25) p.234
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

9. Capacitance of Magic Barium Clusters..... 517
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan (2000.8.20-25) p.237
Q. Wang, Q. Sun, Z-J. Yu, M. Sakurai and Y. Kawazoe

10. *Ab-initio* Quasiparticle Energies of Small Sodium Clusters by the *GW* Approximation..... 518
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan (2000.8.20-25) p.238
Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

11. Atomistic Calculation of the fcc-bcc Phase Transformation in Elemental Calcium..... 519
Fifth International Conference on Nanostructured Materials, Sendai, Japan (2000.8.20-25) p.306
K. Yoshida, F. Kawai, M. Sluiter and Y. Kawazoe

12. Marangoni Convection in Model of Floating Zone under Microgravity..... 520
CGCT-1, 2000 (The 1st Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology), Sendai, Japan (2000.8.29-9.1) p.378
Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, K. Higashino and Y. Kawazoe

13. Lattice Monte Carlo Simulation with Renormalized Potentials in Si and Cu-Au System..... 521
CGCT-1, 2000 (The 1st Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology), Sendai, Japan (2000.8.29-9.1) p.384-385
R. Sahara, H. Ichikawa, H. Mizuseki, K. Ohno and Y. Kawazoe

14. Growth of Mn Doped ZnO in Porous SiO₂ and Luminescence Properties... 523
CGCT-1, 2000 (The 1st Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology), Sendai, Japan (2000.8.29-9.1) p.448
N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, T. Yao, Y. Kawazoe, A. Yamamoto and T. Goto

15. Theoretical Study of Hydrogen-Related Complexes in Diamond for Low Resistivity n-Type Diamond Semiconductor..... 524
SLCS-9 (The 9th International Conference on SHALLOW-LEVEL CENTERS IN SEMICONDUCTORS), Awaji Island, Hyogo, Japan (2000.9.24-27) p.45
Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Katayama-Yoshida and Nozomi Orita

16. Realization of an Ultra-high Magnetic Field on a Nano-Scale..... 525
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels, Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.5-7
S. T. Chui, Jian-Tao Wang, Lei Zhou, K. Esfarjani and Y. Kawazoe

17. Mixed Basis Calculations of Small Molecules and Clusters..... 528
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels, Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.11
M. Sluiter, K. Ohno, Y. Maruyama and Y. Kawazoe

18. Hund's Rule and Ordering in Binary Clusters..... 529
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels, Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.15
Vijay Kumar and Y. Kawazoe

19. First-Principles Studies on Magnetic Properties of Magnetic Multilayers... 530
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels, Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.19-20
Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

20. Orbital Correlation Effects in Transition Metal Systems : Linear Chains,
Microclusters and Thin Films..... 532
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.21-22
Lei Zhou, Dingsheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
21. Spin-polarized Transport in Magnetically Modulated Heterostructures..... 534
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.23
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
22. Lattice Dynamics Simulations of Crystals at Wide Interval of Temperature
and Pressure: Structure, Vibration Spectrum and
Thermodynamic Properties..... 535
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.25-27
V. R. Belosludov, V. P. Shpakov, J. S. Tse, R. V. Belosludov
and Yoshiyuki Kawazoe
23. First-Principles Study on Phase Stability in Al-Ag Alloy under
High Pressure..... 538
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.31
Jing-Zhi Yu, Marcel Sluiter and Y. Kawazoe
24. Phase Segregation in Mixed Fermion Droplets..... 539
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.43
K. Esfarjani, S. T. Chui, V. Kumar and Y. Kawazoe
25. Real Space Representation for Electronic Shell Structure of Magic
Cluster..... 540
Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.47
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, M. Sluiter and Y. Kawazoe

26. Charge Transfer at Doped Nanotube Junctions..... 541
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.63-64
 Amir Abbas Farajian, Keivan Esfarjani and Masuhiro Mikami
27. Stable Structures and Electronic States of Fullerene Encapsulation
 in Single Wall Carbon Nanotube by Tight-Binding Model..... 543
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.67-68
 T. Ishii, K. Esfarjani, Y. Hashi, Y. Kawazoe and S. Iijima
28. Strain Induced Alloying in Semiconductor
 Heterostructures..... 545
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.73
 S. Vannarat, Marcel H. F. Sluiter and Y. Kawazoe
29. Structures and Stability of Al₇C and Al₇N Clusters..... 546
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.79
 Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, V. Kumar and Y. Kawazoe
30. Molecular Dynamics Simulation on Deformation Dynamics of Ni
 and Ni₃Al Single Crystals..... 547
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.81
 Ryota Kaneko, Tomoyasu Aihara and Yoshiyuki Kawazoe
31. Why Does Pressure Not Stabilize the fcc Phase over the bcc
 Phase in Elemental Ca? 548
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.87
 K. Yoshida, M. Sluiter and Y. Kawazoe

32. Prediction of Structures of Carbon Compounds by All-Electron First Principles Calculation Compared with XPS Experiment..... 549
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.91-92
 Tsuguo Morisato, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Isao Kusunoki
33. Nano-Scale Cluster Growth and Deposition Process by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 551
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.93-94
 Kenta Hongo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille
34. Stable Structures of Vanadium Clusters: Tight-Binding Molecular-Dynamics Study..... 553
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.95
 Akito Taneda and Yoshiyuki Kawazoe
35. New Materials Formation in Carbon Clusters by Using Nuclear Recoil... 554
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.97
 T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga and Y. Kawazoe
36. Stable Structures and Electronic States in Carbon Nano-Horns by Tight-Binding Model..... 555
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) pp.99-100
 T. Ishii, K.Esfarjani, Y. Hashi, Y. Kawazoe and S. Iijima
37. Absolute Value of Quasiparticle Energies of Small Sodium Clusters by *Ab-initio* GW Approximation..... 557
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.107
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

38. All-Electron Mixed-Basis Calculation to Optimize Structures of Vanadium Micro Clusters..... 558
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.109
 Y. C. Bae, H. Osanai, K. Ohno, M. Sluiter and Y. Kawazoe
39. Interaction of Interstitial Atoms with Interstitial Cluster in Bcc Iron..... 559
 Material Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels,
 Sendai, Japan (2000.8.18-19) p.111
 H. Kamiyama, T. Nishikawa, Y. Kawazoe and H. Matsui
40. Effect of Inter-Island Interaction on the Growth of Self-Assembled Quantum Dots..... 560
 Proc. 25th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, Japan (2000.9.17-22)
 pp.389-390
 S. Vannarat, S. T. Chui, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
41. All-Electron Mixed Basis Approach Suitable for *Ab Initio* Molecular Dynamics in Strong Atomic Collisio..... 562
 SNA2000 (Proc. 4th Int. Conf. Supercomputing in Nuclear Applications)
 Tokyo, Japan (2000.9.4-7) p.27
 K. Ohno, T. Morisato, S. Ishii, K. Shiga, M. Sluiter, Y. Kawazoe,
 H. Adachi, Y. Hashi, H. Kamiyama and Y. Maruyama

<2001 年>

1. Formation of Radioactive Fullerenes by Using Nuclear Recoil and Potential Use for Other Fields..... 572
 ISNM2001, Kamakura, Japan (2001.1.15-18) p.76
 T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, K. Shikano and K. Masumoto
2. Molecular Dynamics Simulation on Self-encapsulation of C₆₀ into Single Wall Carbon Nanotube..... 573
 ISNM2001, Kamakura, Japan (2001.1.15-18) p.132
 T. Ishii, K. Esfarjani, Y. Hashi, Y. Kawazoe and S. Iijima

3. Transport Properties of a Nanotube-based Transistor..... 574
 ISNM2001, Kamakura, Japan (2001.1.15-18) p.146
 K. Esfarjani, A. A. Farajian, F. Ebrahimi and Y. Kawazoe

4. Structural Transformations In Single Wall Carbon Nanotube Bundles..... 575
 ISNM2001, Kamakura, Japan (2001.1.15-18) p.154
 V. Kumar, M. Sluiter and Y. Kawazoe

5. Beyond the Standard *Ab initio* Calculations to be Able to Simulate Real
 Physicochemical Properties and Reactions..... 576
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.15
 Yoshiyuki Kawazoe

6. Electronic Structure Calculation for Polyphenyl based Molecular
 Rectifier..... 577
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.29
 C. Majumder, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

7. Effects of the Electronic Structure on a Molecular Electronic Device..... 578
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.31
 J. Q. Lu, J. Wu, H. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

8. Electronic Behavior of Polyphenylene-based Molecular Devices..... 579
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.32
 J. Q. Lu, H. Chen, J. Wu, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

9. Simulation Study on Polyaniline Covered with Cyclodextrins for
 Molecular Device..... 580
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.33
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki
 and Yoshiyuki Kawazoe

10. Behavior of Hydrogen on Aluminum Cluster..... 581
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.34
 H. Kawamura, V. Kumar, Q. Sun and Y. Kawazoe

11. First Principles Study of the Growth of CdSe Clusters..... 582
 4th International Symposium on InterMaterials, Osaka, Japan (2001.2.6-7) p.35
 V. Sundararajan, V. Kumar, Y. Kawazoe, Y. Barnakov, I. Dmitruk
 and A. Kasuya

12. *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation of a Chemical Reaction in Electronic
 Excited States..... 583
 平成12年度科学研究費特定領域研究「分子物理化学」
 国際研究会 Frontiers of Theoretical Chemistry
 東京大学 (2001.3.12-14) p.51
 Kaoru Ohno, Jian Wu and Yoshiyuki Kawazoe

13. What Useful Properties Clusters Have! -*Ab Initio* Study to Reveal
 the Geometrical Structures and Physicochemical Properties of Clusters-... 584
 International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
 (2001.6.9-10) p.A1
 Yoshiyuki Kawazoe

14. Novel Endohedral Fullerene-Like and Cubic Caged Clusters of Silicon:
 $M@Si_{16}$ and $M@Si_{14}$ (M=Transition Metal) 585
 International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
 (2001.6.9-10) p.A2
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

15. Magic Number Clusters in Transition Metal Oxide Clusters..... 586
 International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
 (2001.6.9-10) p.Ca-1
 Masaki Sakurai, Qiang Sun, Kenji Sumiyama and Yoshiyuki Kawazoe

16. Blue Shifts in Ultraviolet Absorption Spectra of Oxide Nanoparticles
 - CeO_x and SnO_y 587
 International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
 (2001.6.9-10) p.Cb-1
 Shin Tsunekawa, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe

17. Formation and Deposition Processes of Clusters Simulated by Multiscale Hybrid-Modeling..... 588
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-1
Kenta Hongo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille
18. Structures and Stabilities of Magic Transition Metal Oxide Clusters..... 589
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-2
Q. Sun, M. Sakurai, Q. Wang, Y. Sumiyama and Y. Kawazoe
19. Transport Through Dimerized Ga and As Atomic Wires Deposited on Si(100) Substrate..... 590
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-3
A. A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
20. Electronic Structure of Small Ionized Manganese Clusters..... 591
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-4
T. M. Briere, Y. Kawazoe, A. Terasaki, A. Matsushita and T. Kondow
21. Structure and Energetics of Neutral and Charged Tin Clusters..... 592
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-5
C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
22. Density Functional Study on Fe-Based Clusters: Application in Heterogeneous Catalysis..... 593
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-6
Rodion V. Belosludov, Seiichi Takami, Momoji Kubo, Akira Miyamoto and Yoshiyuki Kawazoe

23. Novel Ring Structures of Al_nH_{3n} Clusters..... 594
International Symposium on Cluster Assembled Materials, Nagoya, Japan
(2001.6.9-10) p.Cc-7
H. Kawamura, V. Kumar, Q. Sun and Y. Kawazoe
24. Structural Modification of Single-Walled Carbon Nanotubes by
Alkali-Fullerene Plasma Irradiation..... 595
International Conference on Phenomena in Ionized Gases,, Nagoya, Japan
(2001.7.17-22)
G.-H. Joeng, R. Hatakeyama, T. Hirata, K. Tohji, K. Motomiya,
Y. Kawazoe and N. Sato

IV. 紀要等

1. *Ab Initio* Study of Phonons in Hexagonal GaN..... 597
Institute of Nuclear Physics (IFJ), Krakow, Poland (1999) pp.302-303
K. Parlinski and Y. Kawazoe
2. 中性子照射黒鉛に生ずる安定な空孔クラスター:魔法数空孔クラスター
共同利用研究経過報告書 第15回..... 599
付属材料試験炉利用施設 (1999.3) pp.146-151
長谷川雅幸、島村健男、永井康介、唐政、川添良幸、千葉利信、竹中稔、
蔵本英一、岩田忠夫
3. Formation of New Materials in Fullerenes by Using Nuclear Recoil..... 605
核理研研究報告 第33巻 (2000.12) pp.70-78
T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, Y. Maruyama,
K. Shikano and K. Masumoto
4. Webによる文献データベースKINDの公開..... 614
技術研究報告 第19号 平成13年3月 (2001.3) pp.1-6
伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、一関京子、三浦重幸、佐藤和弘、
余京智、川添良幸
5. RADIUS認証サーバとISDNダイヤルアップサービスシステムの構築... 620
技術研究報告 第19号 平成13年3月 (2001.3) pp.7-12
三浦重幸、和田繁男、佐藤和弘、伊藤敏行、秋山庸子、一関京子、
余京智、川添良幸
6. 金研スーパーコンピューティングシステムの2000年問題対応..... 626
技術研究報告 第19号 平成13年3月 (2001.3) pp.13-16
一関京子、秋山庸子、伊藤敏行、和田繁男、三浦重幸、佐藤和弘、
川添良幸、豊岡雅人、松本秀一、佐藤俊哉、鬼頭宜行、橋川光一
7. スタンドアロンPCによる快適な研究開発環境実現の試み..... 630
技術研究報告 第19号 平成13年3月 (2001.3) pp.17-23
一関京子、川添良幸

8. 平成 10～12 年度金研重点化ワークショップ実験と計算科学的
アプローチの共同によるナノ物質研究報告書…………… 637
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6)
pp.5-6
川添良幸、大野かおる
9. 実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究
ー実験的アプローチ…………… 639
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6)
pp.130-131
近藤保、寺寄亨、真船文隆、安松久登、市橋正彦、川添良幸
10. クラスタ内包フラーレンの構造と物性…………… 641
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.134
奥健夫、成田一人、川添良幸、大野かおる
11. 巨大分子系の構造と相転移に関する研究…………… 642
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6)
pp.142-143
長谷川正之、大野かおる、川添良幸
12. BCC 合金中の転位と点欠陥の相互作用に関するコンピュータ・
シミュレーション…………… 644
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.194
松井秀樹、神山博、川添良幸
13. NaBr 結晶中の Cu^+ イオンの安定位置…………… 645
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.209
長坂慎一郎、高橋良雄、新井一博、大野かおる、川添良幸
14. 二次電池材料の分子動力学計算に関する研究…………… 646
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.293
西館数芽、伊藤孝徳、川添良幸
15. 超臨界状態の第一原理分子動力学計算…………… 647
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.294
池庄司民夫、劉 子敬、川添良幸

16. 電子励起状態に対するプラズマモードの関与に関する研究…………… 648
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.295
川添良幸、渡辺慎介、大野かおる
17. 実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究…………… 649
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6)
pp.331-340
川添良幸
18. 強相関電子系における位相とスピンの自由度…………… 659
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.66
山中雅則、前川禎通
19. 磁性体における電荷とスピンの競合現象…………… 660
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6) p.233
前川禎通、井上順一郎、伊藤博介
20. フラール光重合ポリマーの構造に関する研究…………… 661
平成 12 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2001.6)
pp.132-133
尾上順、中山知信、原寿樹
21. 理論・シミュレーショングループ…………… 663
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の
極限構造・磁性制御」研究成果報告書 (2000.12) pp.3-4
水関博志、川添良幸

V. 予稿集

<2000年>

1. スーパーコンピューターによる原子レベル新デバイス設計..... 665
第70回 金属材料研究所 夏期講習会 (2000.8.2-4) pp.5(1-22)
川添良幸
2. Stable Structures and Electronic States of Fullerene Encapsulation
in Single Wall Carbon Nanotube by Tight-Binding Model..... 687
第19回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 桐生
(2000.7.27-28) p.72
T. Ishii, K. Esfarjani, Y. Hashi, Y. Kawazoe and S. Iijima
3. Stable Structures and Electronic States in Carbon Nano-Horns
by Tight-Binding Model..... 688
第19回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 桐生
(2000.7.27-28) p.73
T. Ishii, K. Esfarjani, Y. Hashi, Y. Kawazoe and S. Iijima
4. Formation of N-doped C₆₀..... 689
第19回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 桐生
(2000.7.27-28) p.76
Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
5. 第一原理計算によるダイヤモンドの価電子制御とマテリアルデザイン... 690
第61回応用物理学会学術講演会 北海道 (2000.9.3-7, Invited talk) p.6
西松毅
6. コバルト酸化物における熱起電力の理論..... 690
第61回応用物理学会学術講演会 北海道工業大学
(2000.9.3-7) p.14 No.3pR6
小椎八重航、筒井健二、前川禎通
7. 第一原理計算の裏表と正しい発展方法..... 691
金属材料研究所第100回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22)
川添良幸

8. Magic Behavior and Bonding Nature of Hydrogenated Aluminum Clusters..... 692
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.15
H. Kawamura, V. Kumar, Q. Sun and Y. Kawazoe
9. ペロブスカイト型フッ化物のバンド構造の系統的な第一原理計算による研究..... 693
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.16
寺久保憲昭、西松毅、川添良幸、Dorota A. Pawlak、島村清史、福田承生
水関博志
10. Ca と Sr における bcc-fcc 相転移の圧力依存性..... 694
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.17
吉田一徳、川添良幸、Marcel H. F. Sluiter
11. モンテカルロ法によるクラスター堆積過程の研究..... 695
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.18
本郷研太、水関博志、川添良幸
12. Spin-dependent Transport Through Magnetic Heterostructures..... 696
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.19
J. Q. Lu, Y. Guo, B. L. Gu, J. Z. Yu and Y. Kawazoe
13. Ni 単結晶に関する分子動力学シミュレーション..... 697
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.20
金子竜太、相原智康、川添良幸
14. スタンドアロン PC による快適な研究開発環境実現の試み..... 698
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.50
一関京子、川添良幸
15. マンガン酸化物における軌道励起とラマン散乱の理論..... 699
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.1
岡本敏史、石原純夫、前川禎通

16. ペロフスカイト型チタン酸化物における軌道の自由度と
共鳴 X 線散乱の理論..... 700
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.2
石原純夫、前川禎通
17. ペロフスカイト型 Mn 酸化物における軌道の自由度と
共鳴非弾性 X 線散乱の理論..... 701
金属材料研究所第 100 回講演会 秋季講演会 (2000.11.21-22) p.3
近藤 浩、石原純夫、前川禎通
18. *Ab Initio* Molecular Dynamics Study of Isomers of Tin Clusters..... 702
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム-先進材料研究・21 世紀に向けて-
(2000.12.7-8) p.141
C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
19. Formation of New Materials in Fullerenes by Using Nuclear Recoil..... 702
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム-先進材料研究・21 世紀に向けて-
(2000.12.7-8) p.142
T. Otsuki, K. Ohno, K. Shiga and Y. Kawazoe
20. Calculation of Absorption of C60 into Single Wall Carbon Nanotubes..... 702
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム-先進材料研究・21 世紀に向けて-
(2000.12.7-8) p.143
M. Sluiter, Y. Maruyama, K. Ohno and Y. Kawazoe
21. Beyond LDA..... 703
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム-先進材料研究・21 世紀に向けて-
(2000.12.7-8) p.144
Yoshiyuki Kawazoe
22. All-Electron Mixed -Basis Calculation to Optimize Structures and
Electronic Properties of Vanadium Micro Clusters..... 703
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム-先進材料研究・21 世紀に向けて-
(2000.12.7-8) p.145
Y. C. Bae, H. Osanai, M. Sluiter and Y. Kawazoe

23. Phase Separation in Fermion Droplets..... 703
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
(2000.12.7-8) p.149
K. Esfarjani, S. T. Chui, V. Kumar and Y. Kawazoe
24. Analysis of C₆₀ Insertion into Single Wall Carbon Nano Tube by
Molecular Dynamics Simulation..... 704
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
(2000.12.7-8) p.154
Takahumi Ishii, Keivan Esfarjani, Yoshiyuki Kawazoe, Yuichi Hashi
and Sumio Iijima
25. Absolute Value of Quasiparticle Energies of Li Clusters by an *Ab-initio* GW
Approximation..... 704
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
(2000.12.7-8) p.155
Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
26. First-principles Study on High Speed Collisions between Neon Atom and
Carbon Cluster..... 704
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
(2000.12.7-8) p.156
T. Morisato, K. Ohno, Y. Kawazoe, T. Miura and S. M. Lee
27. *Ab-Initio* Molecular Dynamics Simulation of Ni₆ Cluster..... 705
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
(2000.12.7-8) p.157
Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
28. Rotational Symmetry Selection Rule in Nanotube Transistors..... 705
第 12 回日本 MRS 学術シンポジウムー先進材料研究・21 世紀に向けてー
川崎市 (2000.12.7-8) p.162
Keivan Esfarjani, Y. Kawazoe and A. A. Farajian

29. モンテカルロ直接法によるクラスター堆積過程のシミュレーション研究・・・ 706
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.52 No.S1-12
水関博志、本郷研太、川添良幸
30. 第一原理計算による磁気多層膜の持つ特異な磁性の研究…………… 706
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.60 No.S1-27
王建涛、王鼎盛、川添良幸
31. Interfacial Segregation of Transition Metals in Nickel Aluminide…………… 707
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.104 No.S5-11
H. P. Wang, M. Sluiter and Y. Kawazoe
32. 酸化物ナノ粒子の格子定数の異常膨張…………… 707
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.140 No.36
恒川 信、川添良幸、石川賢司、粕谷厚生
33. 第一原理計算による C₆₀とNe 間における原子間ポテンシャルの研究…… 707
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.169 No.125
森里嗣生、大野かおる、川添良幸
34. 第一原理 GW 近似による Li クラスターの準粒子エネルギーの計算…… 708
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.141 No.39
石井 聡、大野かおる、川添良幸
35. 全電子混合基底法によるバナジウムクラスターの安定構造計算…………… 708
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.141 No.40
裴栄造、長内弘喜、大野かおる、川添良幸

36. 全電子混合基底法による Ni6 遷移金属マイクロクラスターの
第一原理分子動力学シミュレーション..... 709
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.141 No.41
志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸
37. *Ab-Initio* Study of Point Defecct Related Excess Elastic Moduli..... 709
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.237 No.327
S. Vannarat, M. Sluiter and Y. Kawazoe
38. Ni、Ni₃Al 単結晶に関する分子動力学シミュレーション..... 709
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 127 回
名古屋大学共通教育棟 (2000.10.1-3) p.237 No.328
金子竜太、相原智康、川添良幸
39. 第一原理計算によるマイクロクラスターの構造決定と物性予測の
現状と将来展望..... 710
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・
磁性制御」第 7 回研究会 仙台 (2000.11.6-7) p.303
川添良幸
40. 1 次元モット絶縁体の非線型光学応答とスピン・電荷分離..... 711
日本物理学会春の分科会講演概要集 第 55 巻 第 1 号 関西大学
(2000.3.22-25) p.637 No.23pN-7
水野義明、筒井健二、遠山貴己、前川禎通

<2001 年>

1. Transport in Nanotube Transistors..... 712
第 20 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集
岡崎 (2001.1.22-23) p.42
Keivan Esfarjani, A. A. Farajian and Y. Kawazoe

2. Structure Deformation of Single-Walled Carbon Nanotubes due to Plasma Ion Irradiation..... 713
 第 20 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 岡崎
 (2001.1.22-23) p.81
 Rikizo Hatakeyama, Goo-Hwan Jeong, Takamichi Hirata, Kazuyuki Tohji, Kenichi Motomiya, Yoshiyuki Kawazoe and Noriyoshi Sato

3. Encapsulation of C₆₀ into Single Wall Carbon Nanotube by Molecular Dynamics Simulation..... 714
 第 20 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 岡崎
 (2001.1.22-23) p.100
 Takafumi Ishii, Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Yoshiyuki Kawazoe and Sumino Iijima

4. 導電性高分子配線の電気伝導シミュレーション研究..... 715
 日本物理学会講演概要集 第 56 回年次大会
 中央大学多摩キャンパス (2001.3.27-30) p.613 No.28aYS-3
 水関博志、Chiranjib Majumder、Hao Chen、Jian Wu、Keivan Esfarjani、西松毅、Vijay Kumar、川添良幸

5. 電子励起状態における化学反応ダイナミクス..... 716
 日本物理学会講演概要集 第 56 回年次大会
 中央大学多摩キャンパス (2001.3.27-30) p.807 No.28pXE-4
 大野かおる、Jian Wu、川添良幸

6. 強磁性体/超伝導体/強磁性体 2 重トンネル接合におけるスピン注入と磁気抵抗..... 717
 日本物理学会講演概要集 第 56 回年次大会
 中央大学多摩キャンパス (2001.3.27-30) p.710 No.28aYE-4
 高橋三郎、今村裕志、前川禎通

7. 熱起電力におけるスピンと軌道縮退の効果..... 719
 日本物理学会講演概要集 第 56 回年次大会
 中央大学多摩キャンパス (2001.3.27-30) p.807 No.28pZA-16
 小椎八重航、前川禎通

8. ペロブスカイト型フッ化物 ABF_3 のバンド構造..... 720
第 48 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集
明治大学駿河台キャンパス (2001.3.28-31) p.302
寺久保憲昭、西松 毅、水関博志、川添良幸、Dorota A. Pawlak、島村清史、
福田承生
9. アルミニウムクラスターへの水素の吸着とマジッククラスターの形成..... 720
日本金属学会講演概要 春季大会 第 128 回
千葉工業大学芝園校舎 (2001.3.28-30) p.144 No.192
川村博昭、Vijay Kumar、孫強、川添良幸
10. Growth Processes of Cluster and Artificial Lattice by Large Scale Computer
Simulation..... 720
日本金属学会講演概要 春期大会 第 128 回
千葉工業大学芝園校舎 (2001.3.28-30) p.444 No.1094
L. T. Wille
11. 3d/Au 人工格子の磁性..... 721
日本金属学会講演概要 春期大会 第 128 回
千葉工業大学芝園校舎 (2001.3.28-30) p.445 No.1097
王建涛、川添良幸
12. モンテカルロ直接法によるクラスター堆積膜の構造に関する研究..... 721
日本金属学会講演概要 春期大会 第 128 回
千葉工業大学芝園校舎 (2001.3.28-30) p.445 No.1098
本郷研太、水関博志、川添良幸
13. Ferromagnetic Doping in Carbon Nanotube..... 722
日本金属学会講演概要 春期大会 第 128 回
千葉工業大学芝園校舎 (2001.3.28-30) p.450 No.1111
Zhen Chen, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

14. SR8000 システムにおける第一原理計算プログラムの並列実行による
効率化実現・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 723
第 20 回シミュレーション・テクノロジー・コンファレンス
中央大学 (2001.6.21) pp.175-178
野手竜之介、安達斉、石井聡、水関博志、Marcel H. F. Sluiter、
大野かおる、川添良幸
15. Electronic Structure of Small Ionized Manganese Clusters・・・・・・・・ 727
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.49-50 No.7p-9
T. M. Briere, Y. Kawazoe, A. Terasaki, A. Matsushita and T. Kondow
16. Magnetic Properties of Magic Ni Oxide Clusters・・・・・・・・ 729
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.51-53 No.7p-10
Q. Sun, M. Sakurai, Q. Wang, J-Z. Yu, K. Sumiyama and Y. Kawazoe
17. Electronic Structure Stability and Fragmentation Behavior of Neutral
and Charged Tin Clusters・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 732
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.55-57 No.7p-11
C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
18. 水素吸着アルミニウムクラスターのリング構造・・・・・・・・ 735
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.63-65 No.7p-13
川村博昭、Vijay Kumar、孫強、川添良幸
19. Ni₆ クラスターとメタノールの第一原理分子動力学計算・・・・・・・・ 738
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.67-70 No.7p-14
志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸
20. モンテカルロ直接法によるクラスター成長過程の研究・・・・・・・・ 742
超微粒子とクラスター懇談会第 5 回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.87-89 No.7p-19
本郷研太、水関博志、川添良幸

21. Metal Encapsulated Caged Clusters of Silicon..... 745
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.91-93 No.7p-20
Vijay Kumar and Y. Kawazoe
22. Quantum Transport thorough Junctions between Ga and As Atomic Wires• 748
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.95-97 No.7p-21
A.A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
23. Density Functional Study on Adsorption of Small Molecules on
Transition Metal Clusters..... 751
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.99-102 No.7p-22
Rodion V. Belosludov, Seiichi Takami, Momoji Kubo, Akira Miyamoto and
Yoshiyuki Kawazoe
24. *Ab Initio* Study on Magic Behaviors or CdSe Clusters..... 755
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.103-106 No.7p-23
V. Kumar, V. Sundararajan, R. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
and A. Kasuya
25. How Does Water Molecule Interact with Al_{13}^+ Cluster?..... 759
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.107-109 No.7p-24
Q. Wang, Q. Sun, J. Z. Yu, T. M. Briere and Y. Kawazoe
26. 酸化物ナノクラスター CeO_x と SnO_y の紫外光吸収..... 762
超微粒子とクラスター懇談会第5回研究会講演論文集 名古屋
(2001.6.7-8) pp.187-188 No.8p-19
恒川信、粕谷厚生、川添良幸

27. Geometric and Electronic Structure Calculations for a Molecular Resonant Tunneling Diode..... 764
 CSW2001 (Computational Science Workshop), Tsukuba, Japan
 (2001.3.11-13) p.36
 Chiranjib Majumder, T. M. Briere, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
28. 水素吸着アルミニウムクラスターのリング構造..... 765
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001.5.24-25) p.21
 川村博昭、Vijay Kumar、孫強、川添良幸
29. 気相成長によるクラスター形成に関する研究..... 766
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.22
 本郷研太、川添良幸、水関博志
30. Numerical Study of Hydrodynamics in Czochralski Crystal Growth..... 767
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.23
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
31. Theoretical Study on Inclusion Complex of Polyaniline Covered by Cyclodextrins for Molecular Device..... 768
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.24
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe
32. Stabilities of Structure and Magnetic Configurations in 3d/Au Superlattices..... 769
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.25
 Jian-Tao Wang and Yoshiyuki Kawazoe
33. Ferromagnetic Doping in Carbon Nanotube..... 770
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.26
 Zhen Chen, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

34. Geometric and Electronic Structure Polyphenyl Based Donor-Spacer-Acceptor Molecular Complex..... 771
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.27
 Chiranjib Majumder, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
35. Adsorption of H₂O on Al₁₃⁺ Cluster..... 772
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.28
 Q. Wang, Q. Sun, J-Z. Yu, T. M. Briere and Y. Kawazoe
36. *Ab Initio* Study of Optimized Geometries and Charge Transfer in Ga and As Dimerized Atomic Wires on Si (100) Substrate..... 773
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.29
 A. A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
37. Composition Profile of Self-Assembled InAs Island on GaAs Substrate... 774
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.30
 Sornthep Vannarat, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
38. SR8000 システムにおける第一原理計算プログラムの並列実行による効率化実現..... 775
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.61
 野手竜之介、五十嵐伸昭、一関京子、伊藤敏行、安達斉、石井聡
 水関博志、Marcel H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸
39. 熱起電力におけるスピンと軌道縮退の効果..... 776
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.1
 小椎八重航、前川禎通
40. ジョセフソン接合系でのスピнкаレントの理論..... 777
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.2
 山下太郎、高橋三郎、今村裕志、小山富男、前川禎通
41. 二次元モット絶縁体の共鳴 2-マグノンラマン散乱..... 778
 金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.3
 小野寺啓祥、筒井健二、遠山貴己、前川禎通

42. ペロフスカイト型 Mn 酸化物における軌道の自由度と
共鳴非弾性X線散乱の理論..... 779
金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.4
近藤浩、石原純夫、前川禎通
43. ペロフスカイト型チタン酸化物における軌道秩序とスピン波..... 780
金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.5
畠山知彦、石原純夫、前川禎通
44. Cotunneling Effects in Ferromagnetic Single-Electron Transistors..... 781
金属材料研究所第 101 回講演会 春季講演会 (2001. 5.24-25) p.7
J. Martinek, J. Barnas, S. Maekawa, H. Schoeller and G. Schon
45. 電子励起状態における反応・衝突過程..... 782
第 5 回理論化学討論会講演要旨集 仙台
(2001. 5.17-19) p.48
大野かおる、Jian Wu、川添良幸
46. C₆₀ Encapsulation inside Single-Walled Carbon Nanotubes
Using Alkali-Fullerene Plasma Method..... 783
第 14 回プラズマ材料科学シンポジウム 東京大学弥生講堂
(2001.6.13-14)
G.-H. Jeong, R. Hatakeyama, T. Hirata, K. Tohji, K. Motomiya,
Y. Kawazoe and N. Sato

VI. 研究会等

1. 『International Workshop on Materials Design by Computer Simulation at Atom and Electron Levels (ISRE2000) 』
Sendai International Center (2000.8.18-19)
Edited by Yoshiyuki Kawazoe, Vijay Kumar and Jing-Zhi Yu
2. 『実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究』
金研重点化ワークショップ (2000.8.18-19)
代表者 川添良幸

VII. 新聞記事

1. 『46ヶ国から参加国際シンポ開幕－東北大主催－』…………… 785
河北新報 (2000.8.19)
2. 『日中の懸け橋－仙台地区中国学友会特別顧問－』…………… 785
河北新報夕刊 (2001.3.13)
3. 『球状分子シリコンで可能－超高密度 IC に道－』…………… 785
日本経済新聞 (2001.7.23)
4. 『21世紀夢の技術展 "ゆめテク"
－未来に続く夏休み 東京ビッグサイトにて－』…………… 786
日本経済新聞夕刊 (2000.7.29)
5. 『日立が東北大に高性能大規模スパコンを納入』…………… 788
電波新聞 (2001.4.14)
6. 『スーパーコンピューター「SR8000」稼働』…………… 788
日刊工業新聞 (2001.4.16)
7. 『スーパーコン東北大に納入』…………… 788
日経産業新聞 (2001.4.16)

8. 『最高水準の演算能力ー新スパコンを披露ー』…………… 789
河北新報 (2001.5.17)
9. 『新型スパコンの導入披露式典開く』…………… 789
日刊工業新聞 (2001.5.17)
10. 『新たな飛躍に』…………… 790
日刊工業新聞 (2001.5.18)
11. 『スパコンで構造決定金属内包、最小のシリコンクラスター』…………… 790
日刊工業新聞 (2001.7.24)
12. 『更新、新システム導入ー速度40倍 世界14位の性能ー』…………… 791
産経新聞 (2001.5.22)
13. 『物質の性質決める基本粒子新種「オービトン」確認』…………… 792
河北新報 (2001.6.18)
14. 『シリコンでも「フラーレン」スパコンで発見 超微少新素材開発に道』…… 793
河北新報 (2001.8.22)

VIII. 雑誌等掲載解説記事

1. 『高度情報化社会の裏表
ーデータベース構築・利用とネットワーク化の真実ー』…………… 794
文学 第1巻 4号 (2000.7) pp.166-168
川添良幸
2. 『Construction of a Large Scale 3D Image Database of Human Brain』…………… 797
情報知識学会誌 第10巻 2号 (2000.7) pp.2-11
Kazuhiro Shida, Yoshiyuki Kawazoe, Kazuya Kumekawa,
Ryuta Kawashima, Masao Otsuki and Hiroshi Fukuda
3. 『ワークショップ報告(3)
実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究』…………… 807
IMR ニュース Vol.33 (2000.7) pp.58-65
川添良幸
4. 『ダンダリングボンドの走査トンネル顕微鏡像と第一原理計算による
電荷分布の決定』…………… 815
東北大学要覧 2000 (2000.12) p.380
川添良幸
5. 『クラスター特性の理論的究明』…………… 816
クラスター科学 新しいナノサイエンスの開拓に向けて
(2001.3) pp.49-53
川添良幸
6. 『材料設計における基本的な考え方』…………… 821
化学総説"高精度分子設計と新素材開発"Vol.46 (2000) pp.157-166
吉田元二、川添良幸
7. 『あるスパコンの一生』…………… 831
bit 2月号 (2001.2) pp.39-46
川添良幸、水関博志

8. 『共同利用研究会レポート
実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究』…………… 839
KINKEN Vol.34 (2001.2) p.3
川添良幸

9. 『フラーレンへの異原子挿入の可能性を探る』…………… 840
季刊フラーレン 科学と技術の最前線 通巻 32 号 Vol.19 No.1
(2001.3) pp.177-193
大槻 勤、大野かおる、川添良幸

10. 『通信・放送機構 青葉脳画像リサーチセンターの紹介…………… 857
—統合的先端脳画像情報通信ネットワークに関する研究開発—』
画像電子学会誌 第 30 卷 第 2 号 (2001) pp.182-184
鈴木一正、志田和人、早川友恵、川添良幸、大槻昌夫、
川島隆太、福田寛

11. 『中国海外研修報告』…………… 860
技術部ニュース Vol.25 (2001.1) pp.4-5
和田繁男

IX. 書籍

1. Theoretical Insights into Fullerenes Adsorbed on Surfaces:
Comparison with STM Studies..... 861
Advances in Materials Research, 2 (1999), pp.113-142
Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
2. Mesoscopic Work Function Measurement by Scanning Tunneling
Microscopy..... 891
Advances in Materials Research, 2 (1999), pp.210-219
Y. Hasegawa, J. F. Jia, T. Sakurai, Z. Q. Li, K. Ohno and Y. Kawazoe

X. 表彰

1. 『電子ビーム照射による Pd インターカレートグラファイトの形成
構造解析と第一原理計算による構造最適化』..... 916
日本金属学会金属組織写真佳作賞(2000.3.29)
奥健夫、Qiang Sun、Ding-Sheng Wang、Qian Wang、川添良幸、
Gunter Schmid、菅沼克昭
2. 『Web の利用による金属学会報検索システムの考案』..... 917
文部科学大臣賞(2001.4.16)
伊藤敏行、和田繁男

XI. その他

1. Science & Technology of Japan #42 「東北大学金属材料研究所」
2001.12.31 Jチャンネル放映・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 919
2. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員・・・・・・・・・・・・ 920
3. 計算材料学センター長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員等一覧・・ 921
4. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 922
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 923