

# 2002 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

(2002 年 4 月～2003 年 3 月)

## 目次

### 巻頭言

ノーベル化学賞受賞者 ウォルター・コーン教授による本センター  
責任部門センター長研究室の評価

### I. 研究内容概要

1. Magnetism in clusters of non-magnetic elements, Pd, Rh, and Ru..... 1  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
2. Hydrogenated Silicon Fullerenes..... 4  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. Novel Metal-Encapsulated Caged Clusters of Silicon and Germanium and their  
Assemblies..... 7  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
4. Structural Transformations in Single Wall Carbon Nanotubes upon Bundle  
Formation..... 10  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, Marcel H. F. Sluiter  
and Yoshiyuki Kawazoe
5. Ferrimagnetic Behavior of Mn Clusters..... 12  
IMR, Tohoku University Tina Marie Briere, M. H. F. Sluiter, Vijay Kumar  
and Yoshiyuki Kawazoe
6. Na Adsorption on the Si(111)-7×7 Surface..... 14  
IMR, Tohoku University Tina Marie Briere, Vijay Kumar  
and Yoshiyuki Kawazoe

7. 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Ⅲ..... 17  
 東北大学金属材料研究所 水関博志, 五十嵐伸昭, 野手竜之介, 佐藤博之, 新村健二, 菊地良幸, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Jian-Tao Wang, J. Q. Lu, J. Wu, Hao Chen, 川添良幸
  
8. Prediction of XPS spectra of silicon self-interstitials with the all-electron mixed basis method..... 21  
 IMR, Tohoku University Takeshi Nishimatsu, Marcel Sluiter, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe, Seiko Epson Corp. Yuzuru Sato, Masayasu Miyata and Masamitsu Uehara
  
9. Site Occupation in the Ni-Nb  $\mu$  Phase..... 23  
 IMR, Tohoku University Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe  
 Lab. de Phys. et Modélisation des Milieux Condensés Alain Pasturel
  
10. Marangoni Convection in the LiCaAlF<sub>6</sub> Crystal Growth by the Czochralski Technique..... 28  
 IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe  
 Dep. of Engineering Mechanics, Chongqing University Jingqiu Chen  
 IMRAM, Tohoku University Kiyoshi Shimamura and Tsuguo Fukuda
  
11. Nanoelectromechanical sensors and switches based on bent carbon nanotubes..... 30  
 IMR, Tohoku University A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe  
 Mechanical Engineering and Mat. Sci. Dep. Rice University B. I. Yakobson
  
12. *Ab initio* geometry optimization and electronic structure of Cs-doped nanotubes..... 31  
 IMR, Tohoku University A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe  
 Dep. of Electronic Engineering, Tohoku Univ. G.-H. Jeong, R. Hatakeyama and T. Hirata

13. Transport through mechanically deformed nanotubes..... 32  
 IMR, Tohoku University A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe  
 Mechanical Engineering and Mat. Sci. Dep. Rice University B. I. Yakobson
14. Realization of "Molecular Enamel Wire" Concept for  
 Molecular Electronics..... 33  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Sato, A. A. Farajian,  
 H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe
15. Theoretical Study of Clathrate Hydrates with Multiple Occupation..... 36  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, N. D. Luzhkovskaya,  
 Marcel Sluiter and Y. Kawazoe  
 Institute of Inorganic Chemistry, Novosibirsk, Russia V. R. Belosludov
16. Theoretical study of polarons and self-trapped excited states in one-dimensional  
 $C_{60}$  crystal..... 39  
 Institute of Inorganic Chemistry, Novosibirsk, Russia V. R. Belosludov and  
 T. M. Inerbaev  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
17. Thermodynamics and Mechanical Stability of Clathrate Hydrates of Cubic  
 Structures I and II ..... 41  
 Institute of Inorganic Chemistry, Novosibirsk, Russia V. R. Belosludov,  
 T. M. Inerbaev and Oleg S. Subbotin  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe  
 Center for Northeast Asian Studies, Tohoku University Jun-ichi Kudoh
18. 全電子混合基底 GW 計算による Si クラスターの準粒子エネルギー..... 44  
 東北大学金属材料研究所 石井 聡, Vijay Kumar, 川添良幸  
 横浜国立大学 大学院工学研究院 大野かおる
19. セメントの水和反応生成物の形成過程に関する数値シミュレーション..... 46  
 秋田高専 環境都市工学科 桜田良治  
 東北大学金属材料研究所 Tina M. Briere, 余 京智, 川添良幸

20. 全電子混合基底法の応用..... 47  
横浜国立大学 大学院工学研究院 大野かおる  
横浜国立大学 工学部 志賀圭一郎  
東北大学金属材料研究所 森里嗣生, 石井 聡, 川添良幸  
東北大学 学際科学研究センター 粕谷厚生
21. 全電子混合基底法によるC<sub>60</sub>への異種原子内包シミュレーション..... 49  
横浜国立大学 工学部 志賀圭一郎  
横浜国立大学 大学院工学研究院 大野かおる  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
22. 第一原理全電子混合基底法によるSiO<sub>2</sub>/Si(100)界面におけるSi2p化学シフトの計算..... 50  
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 大学院工学研究院 大野かおる
23. 第一原理計算による超格子ナノワイヤーの電子状態の解析..... 52  
東北大学金属材料研究所 川村博昭, Vijay Kumar, 川添良幸
24. 量子モンテカルロ法の原子系への応用..... 54  
東北大学金属材料研究所 本郷研太, 川添良幸
25. Magnetic Properties of Transition Metal Doped Silicon Nanotubes..... 55  
IMR, Tohoku University Abhishek K. Singh, Tina M. Briere,  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
26. 遷移金属原子ドーピング単層カーボンナノチューブの構造及び物性..... 58  
東北大学金属材料研究所 八木陽介, Tina M. Briere, Vijay Kumar,  
Marcel H. F. Sluiter, Amir A. Farajian, 川添良幸
27. ドナー・スパーサー・アクセプター構造を持つ分子整流器の理論的考察... 59  
東北大学金属材料研究所 新村健二, 水関博志, 川添良幸  
Bhabha Atomic Research Center Chiranjib Majumder
28. 絶縁被覆された分子デバイス用導線の構造と電子状態..... 61  
東北大学金属材料研究所 佐藤博之, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian, 水関博志, 川添良幸

29. 物理乱数を用いた超大規模モンテカルロシミュレーションによる  
濾過現象を例とした表面現象へのアプローチ..... 63  
東北大学金属材料研究所 野手竜之介, 水関博志, 川添良幸
30. 第一原理計算によるZnP-C<sub>60</sub>太陽電池の研究..... 65  
東北大学金属材料研究所 五十嵐伸昭, 水関博志,  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添良幸
31. 分子動力学法によるジルコニウム水素化物の熱伝導度の評価..... 67  
東北大学金属材料研究所 小無健司, 川添良幸, 松井秀樹  
産業技術総合研究所 計算科学研究部門 池庄司民夫
32. Report of *ab initio* Studies on Nano Structures..... 71  
IMR, Tohoku University Q. Sun and Y. Kawazoe
33. Report of *ab initio* Studies on Clusters..... 72  
IMR, Tohoku University Q. Wang and Y. Kawazoe
34. 生体高分子の構造と機能: 新材料への応用に向けて..... 74  
弘前大学 理工学部 種田晃人  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
35. Computer simulations of various polymers..... 75  
Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University Kazuhito Shida  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
36. The Study of Molecular Electronic Devices..... 77  
Physics Department, Fudan University, China H. Chen  
Center for Advanced Study, Tsinghua University, China J. Q. Lu and J. Wu  
IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
37. ロジウムクラスターの構造最適化と磁性..... 79  
株式会社 コーデック 斐 栄造, 長内弘喜  
東北大学金属材料研究所 Vijay Kumar, 川添良幸

38. Electronic Transport in Several Low-Dimensional Quantum Structures..... 80  
 Department Physics, Tsinghua University, China Yong Guo, Bing-Lin Gu  
 and Jun-Qiang Lu  
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
39. Stability of group-V elements dimer linear chains on Si(001) surfaces..... 83  
 IMR, Tohoku University Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe  
 Chinese Academy of Science, China Ding-Sheng Wang and En-Ge Wang
40.  $ZrO_2$ - $Y_2O_3$  イオン結晶の副格子モデルによる歪みエネルギー解析..... 85  
 東北大学大学院 工学研究科 佐原亮二, 久保 紘  
 東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. 厳密対角化法による  $t$ - $J$  模型の励起スペクトルの研究..... 86  
 東北大学金属材料研究所 遠山貴己, 前川禎通
42. 銅酸化物モット絶縁体の光励起状態と非線形光学応答..... 87  
 東北大学金属材料研究所 高橋 亮, 遠山貴己, 前川禎通
43. 強相関電子系におけるフォノン・スペクトルの数値計算..... 89  
 東北大学金属材料研究所 筒井健二
44. モット絶縁体の光励起状態と共鳴2マグノンラマン散乱..... 90  
 東北大学金属材料研究所 小野寺啓祥, 筒井健二, 遠山貴己, 前川禎通
45. 多層系高温超伝導体のトンネル電流特性..... 91  
 東北大学金属材料研究所 森 道康, 遠山貴己, 前川禎通
46. 超伝導体へのスピン注入の理論的研究..... 92  
 東北大学金属材料研究所 山下太郎, 高橋三郎, 前川禎通  
 東北大学大学院 情報科学研究科 今村裕志
47. Report of Research based on Use of CCMS Supercomputing System..... 94  
 IMR, Tohoku University José A. Riera

48. Spin Injection and Detection in Magnetic Nanostructures..... 98  
IMR, Tohoku University S. Takahashi and S. Maekawa
49. 軌道自由度のある遷移金属酸化物における共鳴非弾性X線散乱の理論・ 99  
東北大学大学院 理学研究科 石原純夫
50. Spin-Dependent Single-Electron-Tunneling in Double and Triple Tunnel Junctions..... 100  
IMR, Tohoku University Franck Ernult, Seiji Mitani and Koki Takanashi
51. モンテカルロシミュレーションによる溶液成長歪み誘起多結晶化メカニズムの解明..... 103  
東北大学金属材料研究所 宇治原徹
52. Dynamics of Cu diffusion and precipitating in dilute Fe-Cu alloys: First-principles and kinetic Monte Carlo simulations..... 106  
IMR, Tohoku University Z. Tang, Y. Nagai and M. Hasegawa
53. 有機分子を内包させたカーボンナノチューブの構造解析..... 108  
東北大学金属材料研究所; CREST 高野 琢, 竹延大志, 岩佐義宏
54. リアクト・アンド・ワインド法による CuNb/Nb<sub>3</sub>Sn 超伝導コイルの高電磁力下における通電特性..... 111  
東北大学金属材料研究所; 科技団 西島 元, 淡路 智, 渡辺和雄  
古河電気工業株式会社 三好一富, 木村昭夫

## II. 原著論文

### <1994 年>

1. 材料科学のためのコンピューターネットワーク環境  
ーなぜ材料科学に必要なのかー…………… 113  
まてりあ, 33[10](1994) pp.1241-1244  
川添良幸
2. C<sub>60</sub> 電子雲のサイエンティフィック・ビジュアリゼーション…………… 117  
まてりあ, 33[10](1994) pp.184-185  
川添良幸

### <1995 年>

1. Hyperfine Field and Electronic Structure in Fe/Co and Fe/Ni Multilayer  
Systems…………… 119  
Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 382(1995) pp.247-252  
Manabu Takahashi, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
2. 材料科学研究におけるスーパーコンピューティング…………… 125  
情報処理学会, 36[2] (1995) pp.149-153  
川添良幸
3. メモリー素子へ応用できるか…………… 130  
化学, 50[6] (1995) pp.360-361  
川添良幸, 大野かおる

### <2001 年>

1. Nanocrystalline Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> : Mn<sup>2+</sup> Grown in Oxidized Porous  
Silicon…………… 132  
Nanotechnology, 12 (2001) 547-551  
N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, A. Yamamoto,  
T. Yao, Y. Kawazoe and T. Goto



<2002 年>

1. *Ab Initio* Study of Donor-Hydrogen Complexes for Low-Resistivity n-Type Diamond Semiconductor..... 137  
Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.1952-1962  
Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Katayama-Yoshida and Nozomi Orita
2. Effect of Strain on Alloying in InAs/GaAs Heterostructure..... 148  
Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.2536-2541  
Sornthep Vannarat, Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
3. Localized Valence States Characteristics and Work Function of Single-Walled Carbon Nanotubes: A First-Principles Study..... 154  
Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.1554221-1554225  
Gang Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
4. Symmetry-Driven Phase Transformations in Single-Wall Carbon-Nanotube Bundles under Hydrostatic Pressure..... 159  
Phys. Rev. B, 65[16] (2002) pp.1614021-1614024  
Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
5. Electric Structures of Perovskite-type ScRh<sub>3</sub>B<sub>x</sub> (0≤x≤1): X-ray Photoelectron and Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopies and *Ab Initio* Band Calculation..... 163  
J. Alloys Compd., 339 (2002) pp.317-326  
Masaoki Oku, Toetsu Shishido, Takeshi Shinohara, Tsuguo Fukuda, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuaki Wagatsuma
6. Structural and Optical Properties of Oxidized Porous Silicon Layers Activated by Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>:Mn<sup>2+</sup>..... 173  
J. Electrochem. Soc., 149[4] (2002) pp.G251-G256  
Nima Taghavinia, Gilles Lerondel, Hisao Makino, Andera Parisini, Aishi Yamamoto, Takafumi Yao, Yoshiyuki Kawazoe and Takenari Goto

7. Boron-Carbon Atomic Ratio Dependence on the Hardness and Oxidation Resistance of Solid Solutions of Perovskite-Type Borocarbide  $\text{YRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) ..... 179  
 Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.3031-3032  
 Toetsu Shishido, Jinhua Ye, Shigeru Okada, Kunio Kudou, Masaoki Oku, Kazuo Obara, Takamasa Sugawara, Akira Yoshikawa, Yoshio Ishizawa, Makoto Ogawa, Kiyokata Iizumi, Iwami Higashi, Tadaaki Amano, Shigemi Kohiki, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima
  
8. Nano-Indentation Hardness and Elastic Moduli of Bulk Single-Crystal AlN ..... 181  
 Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.4620-4621  
 Ichiro Yonenaga, Toshiyuki Shima and Marcel H. F. Sluiter
  
9. Artificial Nanocluster Crystal: Lattice of Identical Al Clusters ..... 183  
 Appl. Phys. Lett., 80[17] (2002) pp.3186-3188  
 Jinfeng Jia, Jun-Zhong Wang, Xi Liu, Qi-Kun Xue, Zhi-Qiang Li, Y. Kawazoe and S. B. Zhang
  
10. Spin-filter Diode Based on  $\text{ZnSe}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}/\text{Zn}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Se}/\text{ZnSe}$  Heterostructures ..... 186  
 Appl. Phys. Lett., 80[24] (2002) pp.4591-4593  
 Yong Guo, Xin-Yi Chen, Feng Zhai, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. First-Principles Calculations of Metal Stabilized  $\text{Si}_{20}$  Cages ..... 189  
 Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.2354171-2354175  
 Qiang Sun, Qian Wang, Tina Marie Briere, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Purusottam Jena
  
12. Multiscale Simulation of Cluster Growth and Deposition Processes by Hybrid Model Based on Direct Simulation Monte Carlo Method ..... 194  
 Compt. Mater. Sci., 24 (2002) pp.88-92  
 Hiroshi Mizuseki, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Luc Theo Wille

13. Structural Investigation of Thiophene Thiol Adsorption on Au Nanoclusters: Influence of Back Bonds..... 199  
J. Chem. Phys., 117[6] (2002) pp.2819-2822  
Chiranjib Majumder, Tina Marie Briere, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
14. *Ab initio GW* Quasiparticle Calculation of Small Alkali-Metal Clusters... 203  
Phys. Rev. B, 65[24] (2002) pp.2451091-2451096  
Soh Ishii, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Steven G. Louie
15. Metal-Encapsulated Caged Clusters of Germanium with Large Gaps and Different Growth Behavior than Silicon..... 209  
Phys. Rev. Lett., 88[23] (2002) pp.2355041-2355044  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
16. Molecular Resistance in a Molecular Diode: A Case Study of the Substituted Phenylethynyl Oligomer..... 213  
J. Phys. Chem. A, 106[34] (2002) pp.7911-7914  
Chiranjib Majumder, Tina Briere, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
17. Resonant Enhancement and Negative Differential Resistances in Hybrid Magnetic-electric Barrier Structures..... 217  
Phys. Rev. B, 66[4] (2002) pp.453121-453127  
Yong Guo, Feng Zhai, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
18. Atomic Structures and Magnetic Behavior of Mn Clusters..... 224  
Phys. Rev. B, 66[6](2002) pp.644121-644126  
Tina Marie Briere, Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
19. Interactions of a Conjugated Molecular Diode with Small Metal Clusters of Cu, Ag, and Au: First-principles Calculations..... 230  
J. of Chem. Phys., 117[16] (2002) pp.7669-7675  
Chiranjib Majumder, Tina Marie Briere, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

20. Icosahedral Growth, Magnetic Behavior, and Adsorbate-induced Metal-nonmetal Transition in Palladium Clusters..... 237  
 Phys. Rev. B, 66[14] (2002) pp.14441301-14441311  
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
21. Cluster Assembled Metal Encapsulated Thin Nanotubes of Silicon..... 248  
 NANO letters, 2[11] (2002) pp.1243-1248  
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar, Tina Marie Briere and Yoshiyuki Kawazoe
22. First-Principles Study on Work Function of Carbon Nanotubes..... 254  
 Physica B, 323 (2002) pp.196-198  
 Gang Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
23. Electron-Interaction Effects on Transport Characteristics of Nanotubes... 257  
 Physica B Condensed Matter, 323 (2002) pp.242-243  
 A.A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
24. Structural and Electronic Transitions in Single Wall Carbon Nanotube Bundles under Pressure..... 259  
 Physica B, 323 (2002) pp.199-202  
 Vijay Kumar, M. H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
25. Electronic Structure of Single Wall Carbon Nanotube Bundles under Compression as Compared to Graphite and Hexagonal Graphene Stacking..... 263  
 Physica B, 323 (2002) pp.203-205  
 Marcel H. F. Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
26. Fragmentation of Small Tin Cluster Ions ( $\text{Sn}_x^+$ :  $x=4-20$ ) in the Low-Energy Collisions with a Highly Oriented Pyrolytic Graphite Surface..... 266  
 J. of Chem. Phys., 117[9] (2002) pp.4317-4322  
 Yutaka Tai, Junichi Murakami, Chiranjib Majumder, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

27.  $M@Si_{16}$ ,  $M=Ti, Zr, Hf$ :  $\pi$  Conjugation, Ionization Potentials and Electron Affinities..... 272  
 Chem. Phys. Lett., 363 (2002) pp.319-322  
 Vijay Kumar, Chiranjib Majumder and Yoshiyuki Kawazoe
28. Statics and Dynamics of Phase Segregation in Multicomponent Fermion Gas..... 276  
 Eur. Phys. J. D 21, (2002) pp.181-189  
 K. Esfarjani, S. T. Chui, V. Kumar and Y. Kawazoe
29. Design of a Heterostructure Peapod Using Magic Silicon Clusters..... 285  
 Phys. Rev. B, 66 (2002) pp.2454251-2454256  
 Q. Sun, Q. Wang, Y. Kawazoe and P. Jena
30. Simulation Study on Geometric and Electronic Structure of Photovoltaic Molecules..... 291  
 Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 725 (2002) pp.199-203  
 H. Mizuseki, N. Igarashi, C. Majumder, R. V. Belosludov, A. A. Farajian, J.-T. Wang, H. Chen and Y. Kawazoe
31. An Improved Chain Extension Algorithm and Its Application for Various Branched Polymers..... 296  
 J. Chem. Phys., 116[24] (2002) pp.10938-10946  
 Kazuhito Shida, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
32. Monte Carlo Calculation of Second and Third Virial Coefficients of Linear and Star Polymers on Lattice..... 305  
 J. Chem. Phys., 117[21] (2002) pp.9942-9946  
 Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Yo Nakamura
33. Dimer Interactions of Magic  $W@Si_{12}$  Clusters..... 310  
 J. Phys.: Condens. Matter, 14[17] (2002) pp.4503-4508  
 Q. Sun, Q. Wang, T. M. Briere and Y. Kawazoe

34. Marangoni Convection in the LiCaAlF<sub>6</sub> Crystal Growth by the Czochralski Technique..... 316  
 J. of Thermal Sci., 11[4](2002) pp.348-352  
 Zhong Zeng, Jingqiu Chen, Hiroshi Mizuseki, Touetsu Shishido, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe
35. Spin-polarized Transport through a Magnetic Heterostructure: Tunneling and Spin Filtering Effect..... 321  
 Phys. Lett. A, 299 (2002) pp.616-621  
 Jun-Qiang Lu, Yong Guo, Feng Zhai, Bing-Lin Gu, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
36. Automatic Brain Tissue Extraction Method Using Erosion-Dilation Treatment (BREED) From Three-Dimensional Magnetic Resonance Imaging T1-Weighted Data..... 327  
 J. Comput. Assisted Tomography, 26[6](2002) pp.927-932  
 Naoki Miura, Akito Taneda, Kazuhito Shida, Ryuta Kawashima, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Fukuda and Toshio Shimizu
37. Fullerene and Sulfur Compounds..... 333  
 Materials Transactions, 43[7] (2002) pp.1530-1532  
 Hideyuki Takahashi, Eiichiro Matsubara, Rodion Vladimirovich Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuyuki Tohji
38. Growth of Luminescent Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>:Mn<sup>2+</sup> Particles Inside Oxidized Porous Silicon: Emergence of Yellow Luminescence..... 336  
 J. Cryst. Growth, 237-239 (2002) pp.869-873  
 N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, A. Yamamoto, T. Yao, Y. Kawazoe and T. Goto
39. Vortex and Magnetoresistance in Nanomagnet..... 341  
 Phys. Lett. A 298 (2002) pp.410-415  
 Haijin Li, Yongjin Jiang, Y. Kawazoe and Ruibao Tao

40. Structural Stability and Phase Transitions in  $K_8Si_{46}$  Clathrate under High Pressure ..... 347  
 Phys. Rev. Lett., 89[19] (2002) pp.1955071-1955074  
 John S. Tse, Serge Desgreniers, Zhi-qiang Li, Michael R. Ferguson and Yoshiyuki Kawazoe
41. Activation of Porous Silicon Layers Using  $Zn_2SiO_4 : Mn^{2+}$  Phosphor Particles ..... 351  
 J. Luminescence, 96 (2002) pp.171-175  
 N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, A. Parisini, A. Yamamoto, T. Yao, Y. Kawazoe and T. Goto
42. Size and Time Dependences of the Valence States of Sn Ions in Amphoteric Tin Oxide Nanoparticles ..... 356  
 Appl. Surf. Sci., 201 (2002) pp.69-74  
 S. Tsunekawa, J. Kang, K. Asami, Y. Kawazoe and A. Kasuya
43. Electronic Excitations in the Antiferromagnetic Phase of Electron-Doped High- $T_c$  Cuprates ..... 362  
 Physica C, 378-381 (2002) pp.178-181  
 T. Tohyama and S. Maekawa
44. Charge Dynamics in Electron-Underdoped High-  $T_c$  Cuprates ..... 366  
 J. Phys. Chem. Solids, 63 (2002) pp.2357-2359  
 T. Tohyama and S. Maekawa
45. Nonlinear Optical Response in One-Dimensional Mott Insulators ..... 369  
 J. Phys. Chem. Solids, 63 (2002) pp.1599-1602  
 M. Takahashi, T. Tohyama and S. Maekawa
46. Nonlinear Optical Response in Two-Dimensional Mott Insulators ..... 373  
 Phys. Rev. B, 66 (2002) pp.1251021-1251028  
 Makoto Takahashi, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

47. Density Functional Study on Metastable bcc Copper: Electronic Structure and Momentum Density of Positron-Electron Pairs..... 381  
 Phys. Rev. B, 65[19](2002) pp.1951081-1951088  
 Z. Tang, M. Hasegawa, Y. Nagai and M. Saito
48. Resonant Two-Magnon Raman Scattering and Photoexcited States in Two-Dimensional Mott Insulators..... 389  
 Phys. Rev. Lett., 89[25] (2002) pp.2574051-2574054  
 T. Tohyama, H. Onodera, K. Tsutsui and S. Maekawa

<2003 年>

1. Ferromagnetic Spin Coupling in the Manganese Trimer Ion Evidenced by Photodissociation Spectroscopy..... 393  
 J. Chem. Phys., 118[5] (2003) pp.2180-2185  
 Akira Terasaki, Tina Marie Briere, Maria Kulawik, Shinichirou Minemoto, Kensuke Tono, Akira Matsushita and Tamotsu Kondow
2. Formation and Structural Observation of Cesium Encapsulated Single-walled Carbon Nanotubes..... 399  
 Chem. Commun., 1 (2003) pp.152-153  
 Goo-Hwan Jeong, Rikizo Hatakeyama, Takamichi Hirata, Kazuyuki Tohji, Kenichi Motomiya, Toshie Yaguchi and Yoshiyuki Kawazoe
3. Realization of Prediction of Materials Properties by *ab initio* Computer Simulation..... 401  
 Bull. Mater. Sci., 26[1] (2003) pp.13-17  
 Yoshiyuki Kawazoe
4. Electronic Properties of Magnetically Doped Nanotubes..... 406  
 Bull. Mater. Sci., 26[1] (2003) pp.105-107  
 Keivan Esfarjani, Zhen Chen and Yoshiyuki Kawazoe
5. Novel Caged Clusters of Silicon: Fullerenes, Frank-Kasper Polyhedron and Cubic..... 409  
 Bull. Mater. Sci., 26[1] (2003) pp.109-114  
 Vijay Kumar



6. Structures of Mn Clusters..... 415  
 Bull. Mater. Sci., 26[1] (2003) pp.115-116  
 Tina Marie Briere, Marcel H F Sluiter, Vijay Kumar and  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Theoretical Study of the Alkyl Derivative C<sub>37</sub>H<sub>50</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub> Molecule for Use as  
 a Stable Molecular Rectifier: Geometric and Electronic Structures..... 417  
 Compt. Mater. Sci., 27 (2003) pp.161-165  
 Hiroshi Mizuseki, Kenji Niimura, Chiranjib Majumder  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Three-Dimensional Oscillatory Convection of LiCaAlF<sub>6</sub> Melts in Czochralski  
 Crystal Growth..... 422  
 J. Cryst. Growth, 252 (2003) pp.538-549  
 Zhong Zeng, Jingqiu Chen, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura,  
 Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Hemocytes of *Ciona intestinalis* Express Multiple Genes involved in Innate  
 Immune Host Defense..... 434  
 Biochem. and Biophys. Res. Commun., 302 (2003) pp. 207-218  
 Kazuhito Shida, Daichi Terajima, Ryuji Uchino, Shuntaro Ikawa,  
 Makoto Ikeda, Katsutoshi Asano, Toshio Watanabe, Kaoru Azumi,  
 Masaru Nonaka, Yutaka Satou, Nori Satoh, Masanobu Satake,  
 Yoshiyuki Kawazoe and Atsuo Kasuya
  
10. Control of Substituent Ligand Over Current Through Molecular Devices:  
 An *Ab initio* Molecular Orbital Theory..... 446  
 Phys. Rev. B, 67[11] (2003) pp.1134081-1134084  
 H. Chen, J. Q. Lu, J. Wu. R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
11. Stabilization of Si<sub>60</sub> Cage Structure..... 450  
 Phys. Rev. Lett., 90[13] (2003) pp.1355031-1355034  
 Q. Sun, Q. Wang, P. Jena, B. K. Rao and Y. Kawazoe

12. Hydrogenated Silicon Fullerenes: Effects of H on the Stability of  
Metal-Encapsulated Silicon Clusters..... 454  
Phys. Rev. Lett., 90[5] (2003) pp.0555021-0555024  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Theoretical Study of Chlorin-Fullerene Supramolecular Complexes for  
Photovoltaic Devices..... 458  
Jpn. J. Appl. Phys., 42(2003) pp. 2503-2505  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Electronic Structure of Perovskite-type YBRh<sub>3</sub>: X-ray Photoelectron  
Spectroscopy and *ab initio* Band Calculations..... 461  
J. of Alloys and Compounds, 349(2003) pp.206-210  
Masaoki Oku, Toetsu Shishido, Kazuaki Wagatsuma, Qiang Sun  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Spin Injection and Detection in Magnetic Nanostructures..... 466  
Phys. Rev. B, 67[5](2003) pp.0524091-0524094  
S. Takahashi and S. Maekawa
  
16. Doping Dependence of Chemical Potential and Entropy in  
Hole- and Electron-Doped High- $T_c$  Cuprates..... 470  
Phys. Rev. B, 67[9](2003) pp.0925091-0925093  
T. Tohyama and S. Maekawa
  
17. Andreev Reflection in Ferromagnet/Superconductor/Ferromagnet Double  
Junction Systems..... 473  
Phys. Rev. B, 67[9](2003) pp.0945151-0945158  
Taro Yamashita, Hiroshi Imamura, Saburo Takahashi and Sadamichi Maekawa

### III. 国際会議発表論文

#### <2001 年>

1. Formation of Radioactive Fullerenes by Using Nuclear Recoil..... 481  
ISNM 2001(International Symposium on Nanonetwork Materials: Fullerenes,  
Nanotubes, and Related Systems)  
Kamakura, Japan (2001.1.15-18) pp.63-66  
T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, Y. Maruyama,  
K. Shikano and K. Masumoto
2. Structural Transformations in Single Wall Carbon Nanotube Bundles..... 485  
ISNM 2001(International Symposium on Nanonetwork Materials: Fullerenes,  
Nanotubes, and Related Systems)  
Kamakura, Japan (2001.1.15-18) pp.277-280  
Vijay Kumar, M. Sluiter and Y. Kawazoe

#### <2002 年>

1. Simulation Study on Geometric and Electronic Structure of Photovoltaic  
Molecules..... 489  
Proceedings of the Material Research Society Symposium  
(Organic and Polymeric Materials and Devices  
- Optical, Electrical and Optoelectronic Properties)  
San Francisco, U.S.A. (2002.4.1-5) 725 pp.199-203  
H. Mizuseki, N. Igarashi, C. Majumder, R. V. Belosludov,  
A.A. Farajian, J.-T. Wang, H. Chen and Y. Kawazoe
2. Influence of Guest Molecule Size on the Thermal Expansion of Clathrate  
Hydrates of Cubic Structures I and II ..... 494  
Proceedings of ICGH-IV (the 4<sup>th</sup> International Conference on Gas Hydrates)  
Yokohama, Japan (2002.5.19-23) pp.599-603  
V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov and  
Y. Kawazoe

3. Role of Guest Molecules on the Stability of Different Cagelike Structures of Large Water Clusters Investigated by First-principles Calculations..... 499  
 Proceedings of ICGH-IV (the 4th International Conference on Gas Hydrates)  
 Yokohama, Japan (2002.5.19-23) pp.683-686  
 Rodion V. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe, Vladimir R. Belosludov  
 and Fedor A. Kuznetsov
  
4. Elastic Moduli and Mechanical Stability of Clathrate Hydrates of Cubic Structure II ..... 503  
 Proceedings of ICGH-IV (the 4<sup>th</sup> International Conference on Gas Hydrates)  
 Yokohama, Japan (2002.5.19-23) pp.701-705  
 V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
  
5. Molecular Electronics..... 508  
 International Symposium on Novel Materials: From Clusters to  
 Nano-structures, Georgia, U.S.A. (2002.6.3-6) p.21  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Hardness of the Compounds in RE-Rh-B(RE=Rare Earth) Systems..... 509  
 ISBB-'02(14th International Symposium on Boron, Borides and  
 Related Compounds), St. Petersburg, Russia (2002.6.9-14) p.99 No.P56  
 T. Shishido, S. Okada, K. Kudou, J. Ye, M. Oku, I. Higashi, H. Horiuchi,  
 K. Iizumi, Y. Ishizawa, K. Obara, T. Sugawara, M. Tanaka, A. Yoshikawa,  
 Z. Zeng, H. Mizuseki, S. Kohiki, Y. Kawazoe and K. Nakajima
  
7. Spin-Polarized Transport Through Doped Nanotube Junctions in Presence of Applied Magnetic Field..... 510  
 10<sup>th</sup> International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology"  
 St. Petersburg, Russia (2002.6.17-21) pp.528-530 No.TN.06p  
 A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
8. Theoretical Study of Alkyl Derivative C<sub>37</sub>H<sub>50</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub> Molecule for Stable Molecular Rectifier: Geometric and Electronic Structures..... 513  
 The European Materials Research Society '02  
 Strasbourg, France (2002.6.18-21) No.A-1-10  
 Hiroshi Mizuseki, Kenji Niimura, Chiranjib Majumder and  
 Yoshiyuki Kawazoe

9. Theoretical Study of Phthalocyanine-Fullerene Complex for High Efficient Photovoltaic Device: *Ab-Initio* Electronic Structure Calculation..... 513  
The European Materials Research Society '02  
Strasbourg, France (2002.6.18-21) No.F-25  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Isolated Molecular Wire Based on Conducting Polymer Chain Encapsulated in Molecular Nanotube..... 514  
Proceedings of SINCS 2002  
(Shanghai International Nanotechnology Cooperation Symposium)  
Shanghai, China (2002.7.30-8.1) pp.67-68  
Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Hiroyuki Sato,  
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. Theoretical Study of Organic Molecule-Fullerene Mixture for a High Efficiency Photovoltaic Device..... 516  
Proceedings of SINCS 2002  
Shanghai International Nanotechnology Cooperation Symposium  
Shanghai, China (2002.7.30-8.1) pp.73-74  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Chloride-ion Diffusivity and Microstructure of Construction Joint..... 518  
27<sup>th</sup> Conference on Our World in Concrete & Structures  
Singapore (2002.8.29-30) 21 pp.501-508  
R. Sakurada, K. Maruyama, J. Z. Yu and Y. Kawazoe
  
13. Theoretical Study of Porphyrin-Fullerene Supramolecule for Photovoltaic Device and Measurement of Execution Time about Simple Molecules..... 526  
Proceedings of the Third International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies  
Kanazawa, Japan (2002.9.3-6) pp.390-396  
Nobuaki Igarashi, Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

14. Molecular Enamel Wires for Electronic Device: Theoretical Study..... 533  
 The 2002 International Conference on Solid State Devices and Materials  
 Nagoya, Japan (2002.9.17-19) pp.210-211 No.C-4-2  
 Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian,  
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Theoretical Study on Chlorin-Fullerene Supramolecular Complex for  
 Photovoltaic Device..... 535  
 The 2002 International Conference on Solid State Devices and Materials  
 Nagoya, Japan (2002.9.17-19) pp.218-219 No.C-4-6  
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,  
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
16. Effect of Metal Doping on Si and Ge Nanotubes by First-Principles  
 Calculations..... 537  
 Abstracts of ICNME 2002  
 (The 5th International Conference on Nano-Molecular Electronics)  
 Kobe, Japan (2002.12.10-12) pp.79-80 No.PI-28  
 Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe
  
17. Theoretical Study of Insulated Wires based on Polymer Chain Encapsulated in  
 Molecular Nanotube..... 539  
 Abstracts of ICNME 2002  
 (The 5th International Conference on Nano-Molecular Electronics)  
 Kobe, Japan (2002.12.10-12) pp.157-158 No.PII-13  
 Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
18. Theoretical Study of Donor-Spacer-Acceptor Structure Molecule for Use as  
 Stable Molecular Rectifier: Geometric and Electronic Structures..... 541  
 Abstracts of ICNME 2002  
 (The 5th International Conference on Nano-Molecular Electronics)  
 Kobe, Japan (2002.12.10-12) pp.159-160 No. PII-14  
 Hiroshi Mizuseki, Kenji Niimura, Chiranjib Majumder and  
 Yoshiyuki Kawazoe

19. Realization of Insulated Molecular Wire based on Conducting Polymer Encapsulated into Molecular Nanotube..... 543  
 Abstracts of the 6th Engineering Foundation Conference on Molecular-Scale Electronics  
 Florida, U.S.A. (2002.12.15-19) Oral Presentation No.1-1  
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, H. Sato, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
20. Theoretical Study of  $\pi$ -Conjugated Molecule-Fullerene Mixture for a High Efficiency Photovoltaic Device..... 544  
 Abstracts of the 6th Engineering Foundation Conference on Molecular-Scale Electronics  
 Florida, U.S.A. (2002.12.15-19) Oral Presentation No.2-7  
 H. Mizuseki, N. Igarashi, R.V. Belosludov, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
- <2003 年>
1. Stabilization of Si<sub>60</sub> Cage Structure: The Agony and the Ecstasy..... 545  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.107 No.A25 13  
 Y. Kawazoe, Q. Sun, Q.Wang, B. K. Rao and P. Jena
2. Design of a Heterostructure Peapod using Magic Silicon Clusters..... 545  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.185 No.B26 7  
 Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
3. Metal-Semiconductor Transition in Tungsten Oxide Clusters as a Function of Oxygen Uptake..... 546  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.322 No.D33 4  
 Q. Sun, B. K. Rao, P. Jena, D. Stolcic, G. Gantefor and Y. Kawazoe
4. Evolution of the Electronic Structure of Be Clusters..... 547  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] pp.905-906 No.P31 10  
 V. Cerowski, B. K. Rao, S. N. Khanna, P. Jena and Y. Kawazoe

5. All-electron GW Quasiparticle Energies of Small Silicon Clusters····· 547  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.906 No.P31 11  
 Soh Ishii, Kaoru Ohno, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Theoretical Study of Donor-Spacer- Acceptor Structure Molecule for Molecular Rectifier····· 548  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] pp.941-942 No.R1 134  
 Hiroshi Mizuseki, Kenji Niimura, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Theoretical Study on Metal Porphyrin Chain for Use as a Nanoscale Device····· 549  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.969 No.S8 7  
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Nano-sensors based on Nanotubes: Deformed-nanotubes Transport····· 550  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] p.1098 No.V26 6  
 Amir A. Farajian, Boris I. Yakobson, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Effects of Gold Contacts on Transport through Benzene Molecule····· 551  
 March Meeting 2003 (Bulletin of The American Physical Society)  
 Austin, Texas, U.S.A. (2003.3.3-7), 48[1] pp.1136-1137 No.W8 13  
 Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe



#### IV. 紀要等

1.  $\beta$ -Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> 単結晶作製と蛍光特性…………… 553  
平成13年度新素材設計開発施設共同利用研究報告 (2002.6)  
pp. 239-240  
タガヴィニア・ニマ, 牧野久雄, 宍戸統悦, 小原和夫, 菅原孝昌,  
八百隆文, 川添良幸
2. 濾過現象を例としたモンテカルロシミュレーションによる表面現象への  
アプローチ…………… 555  
東北大学金属材料研究所技術部技術研究報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 43-47  
野手竜之介, 水関博志, 川添良幸
3. Web 利用による材料在庫管理システムの構築…………… 560  
東北大学金属材料研究所技術部技術研究報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 49-55  
伊藤敏行, 本郷健一, 松木邦美, 遠藤行男, 三浦重幸, 若生公郎,  
石川由実, 伊藤 学, 中名生充, 川添良幸
4. 東北大学金属材料研究所ネットワークセキュリティ…………… 567  
東北大学金属材料研究所技術部技術研究報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 57-63  
五十嵐伸昭, 伊藤敏行, 野手竜之介, 和田繁男, 三浦重幸, 佐藤和弘,  
一関京子, 川添良幸, 鬼頭宣行, 永島裕之
5. 第一原理計算による ZnP-C<sub>60</sub> 太陽電池の評価…………… 574  
東北大学金属材料研究所技術部技術研究報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 65-68  
五十嵐伸昭, 水関博志, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添良幸
6. 金属材料研究所新スーパーコンピューティングシステムにおける  
Gaussian98 および VASP の性能測定…………… 578  
東北大学金属材料研究所技術部技術報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 69-74  
五十嵐伸昭, 川添良幸

7. 金属材料研究所スーパーコンピューティングシステム..... 584  
東北大学金属材料研究所技術部技術報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 75-82  
一関京子, 川添良幸, 伊藤敏行, 野手竜之介, 五十嵐伸昭, 豊岡雅人,  
松本秀一, 鬼頭宣行, 鈴木敏之, 阿部貴宏, 杉江信明
8. iモード携帯電話からスーパーコンピューターへのアクセスの試み..... 592  
東北大学金属材料研究所技術部技術報告 vol. 20 (2003.3)  
pp. 83-88  
一関京子, 川添良幸, 斐 栄造
9. セメントの水和反応生成物の形成過程に関する数値シミュレーション..... 598  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.102  
桜田良治, Tina M. Briere, 余 京智, 川添良幸
10. プラズマガス凝縮法によるクラスター生成の最適化..... 599  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.137  
隅山兼治, 日原岳彦, 川添良幸, 水関博志
11. シクロデキストリン中の単一分子の電子状態..... 600  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.139  
Bold Gombojav, 吉成武久, 長坂慎一郎, 宮川美樹, 伊藤廣記, 高橋良雄,  
粕谷厚生, 川添良幸
12. 分子被覆導線の構造と物性..... 601  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
pp.140-141  
下村武志, 伊藤耕三, 水関博志, Rodion Belosludov, Amir Farajian,  
Hao Chen, 川添良幸
13. 遷移金属クラスターの物性と反応性—理論と実験との共同..... 603  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
pp.142-143  
近藤 保, 寺寄 亨, 市橋正彦, 安松久登, 川添良幸

14. 超微粒子形成過程の計算科学的解析・・・・・・・・・・・・・・・・ 605  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.144  
池庄司民夫, 川添良幸
15. ビスマス原子細線の原子構造と電気伝導度に関する研究・・・・・・・・ 606  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.189  
三木一司, 矢代 航, 大橋勝文, 成島哲也, 白木一郎,  
Rodion Belosludov, Jian-Tao Wang, 水関博志, 川添良幸
16. 光電子分光スペクトルの第一原理計算・・・・・・・・・・・・・・・・ 607  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
pp.230-231  
大野かおる, 志賀圭一郎, 川添良幸
17. 生体高分子の構造と機能 : 新材料への応用に向けて・・・・・・・・ 609  
平成14年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告(2003.6)  
p.232  
種田晃人

## V. 予稿集・研究会・講演等

### 予稿集

<2002年>

1. スズクラスター正イオンの低エネルギー解離:実験と計算の比較…………… 611  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.33 No.16a-3  
多井 豊, 村上純一, C. Majumder, V. Kumar, 水関博志, 川添良幸
2. 第一原理計算によるフラーレンを含む超分子太陽電池の評価…………… 612  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.39 No.16a-9  
水関博志, 五十嵐伸昭, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添良幸
3. Prediction of the Thinnest SiO<sub>2</sub> Nano Wire by First-principles…………… 613  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.57 No.17a-7  
Q. Sun, Q. Wang and Y. Kawazoe
4. Geometries and Magnetic Properties of Manganese Clusters…………… 614  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.63 No.17p-12  
T. M. Briere, M. H. F. Sluiter, V. Kumar and Y. Kawazoe
5. Magnetism in Clusters of Non-magnetic Elements, Pd, Rh, and Ru…………… 615  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.64 No.17p-13  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
6. Al<sub>n</sub>H<sub>3n</sub> クラスターの環状および鎖状構造と安定性のサイズ依存性…………… 616  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.71 No.ps-5  
川村博昭, V. Kumar, 孫 強, 川添良幸

7. Niクラスターの気相成長シミュレーション研究..... 617  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.72 No.ps-6  
本郷研太, 水関博志, 川添良幸
  
8. 第一原理計算による Au(111)表面へのチオフェン分子吸着の解明..... 618  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.73 No.ps-7  
Chiranjib Majumder, 水関博志, 川添良幸
  
9. First-principles Study of the Endohedral Boron Nitride  $\text{La@B}_{36}\text{N}_{36}$   
Metallofullerence..... 619  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.74 No.ps-8  
Q. Wang and Y. Kawazoe
  
10. 3d 遷移金属をドーブした単層カーボンナノチューブの構造と物性..... 620  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.78 No.ps-12  
八木陽介, Vijay Kumar, Tina M. Briere, 川添良幸
  
11. 分子デバイス用シクロデキストリン-ポリチオフェン分子被覆導線の構造と  
電子状態..... 621  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.79 No.ps-13  
佐藤博之, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 水関博志, 川添良幸
  
12. PNX分子による分子整流器シミュレーション研究..... 622  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.80 No.ps-14  
新村健二, 水関博志, Chiranjib Majumder, 川添良幸

13. Cesium Encapsulation inside Single-Walled Carbon Nanotubes by Plasma-Ion Irradiation..... 623  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.25 No.1-17  
G. -H. Jeong, A. A. Farajian, T. Hirata, R. Hatakeyama, T. Yaguchi,  
K. Tohji, K. Motomiya and Y. Kawazoe
14. Theoretical Study on Carborane-Fullerene Hybrid Materials for NLO Devices..... 624  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.80 No.1P-14  
R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
15. Transport through Mechanically Deformed Nanotubes..... 625  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.90 No.1P-24  
A. A. Farajian, B. I. Yakobson, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
16. *Ab Initio* Study of Cesium-Doped Nanotubes..... 626  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.112 No.1P-46  
A. A. Farajian, G. -H. Jeong, P. Ordejou, H. Mizuseki, T. Hirata and  
Y. Kawazoe
17. Metal Encapsulated Silicon Fullerenes and their Interaction with Hydrogen..... 627  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.158 No.2P-91  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
18. Structural Transformations in Single Wall Carbon Nanotubes upon Bundle Formation..... 628  
第 23 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
松島 (2002.7.17-19) p.159 No.2P-92  
Vijay Kumar, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

19. Computational Combinatorial Materials Science to Predict Nanostructured Devices..... 629  
International Workshop on Cluster Science & Nanotechnology  
Nanjing, China (2002.5.22-24)  
Yoshiyuki Kawazoe
20. Molecular Electronics..... 630  
"凝縮態物理および学際学科"学術シンポジウム 講演概要集  
南京大学物理系, 固体マイクロ構造体物理国家重点実験室  
南京, 中国 (2002.5.22-24) pp.7-8  
Yoshiyuki Kawazoe
21. First-Principles Calculation and Phenomenological Modeling on Hydrogen Solubility in Magnetic Metals..... 632  
"凝縮態物理および学際学科"学術シンポジウム 講演概要集  
南京大学物理系, 固体マイクロ構造体物理国家重点実験室  
南京, 中国 (2002.5.22-24) p.10  
Jin-Zhi Yu, Qian Wang, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
22. スーパーコンピューターによる新材料・新物質・新素材予言..... 633  
金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15)  
川添良幸
23. 鉄族原子をドーピングした単層カーボンナノチューブの構造と物性..... 634  
金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.12  
八木陽介, T. M. Briere, M. Sluiter, V. Kumar, A. A. Farajian, 川添良幸
24.  $\text{KMgF}_3$  および  $\text{BaLiF}_3$  中の  $3d$  遷移金属不純物の第一原理計算..... 635  
金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.13  
西松 毅, 寺久保憲昭, 水関博志, 川添良幸, Dorota A. Pawlak,  
島村清史, 福田承生
25. Realization of Single Molecular Enamel Wires for Electronic Devices..... 636  
金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.14  
Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki,  
Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe

26. Effects of Gold Contacts on Transport through Benzene Molecule..... 637  
 金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.15  
 A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. Marangoni Convection Effect in the LiCaAlF<sub>6</sub> Crystal Growth by  
 the Czochralski Technique..... 638  
 金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.16  
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Jingqiu Chen, Hiroki Sato,  
 Kiyoshi Shimamura, Touetsu Shishido, Tsuguo Fukuda and  
 Yoshiyuki Kawazoe
28. Application of TOMBO to Hydrocarbons in Zeolites..... 639  
 金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.17  
 M. H. F. Sluiter, H. Adachi, T. Kanno and Y. Kawazoe
29. Structure, Stability, and Origin of Bi Dimer Linear Chains on Si(001)  
 Surfaces..... 640  
 金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.18  
 J. -T. Wang, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, T. Hashizume, E. G. Wang and  
 D. -S. Wang
30. スーパーコンピューター結合と超大規模シミュレーション計算による  
 ナノテクノロジー研究ネットワーク  
 —ナノテクノロジーVirtual Private Network の構築—..... 641  
 金属材料研究所 第 104 回講演会 秋季講演会 (2002.11.14-15) p.58  
 一関京子, 和田繁男, 三浦重幸, 佐藤和弘, 伊藤敏行, 野手竜之介,  
 五十嵐伸昭, 鬼頭宣行, 高橋英明, 加賀屋直基, 豊岡雅人, 斎藤篤司,  
 安達 斉, 川添良幸
31. Metal Encapsulation for Novel Nanostructures: The Prediction of the Silicon  
 Fullerene and Other Structures by Computer Experiments..... 642  
 第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.10  
 Vijay Kumar and Y. Kawazoe



32. 第一原理計算による分子デバイス設計..... 643  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.11  
水関博志, Chiranjib Majumder, 佐藤博之, 新村健二,  
Rodion V. Belosludov, Amir Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen, 川添良幸
33. Metal Doped Nanotubes of Silicon..... 644  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.24  
A. K. Singh, V. Kumar, T.M. Briere and Y. Kawazoe
34. Development of TOMBO, an All-electron Full-potential Electronic Structure  
Method..... 645  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.25  
M. H. F. Sluiter, H. Adachi, T. Kannno and Y. Kawazoe
35. 導電性高分子ポリチオフェンのシクロデキストリンによる絶縁被覆及び  
金属電極接合による影響についての理論研究..... 646  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.26  
佐藤博之, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 水関博志, 川添良幸
36. 第一原理計算によるドナー・スペーサー・アクセプター構造をもつ  
分子整流器の機能発現メカニズム解明..... 647  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.27  
新村健二, 水関博志, Chiranjib Majumder, 川添良幸
37. クラスタにより構成される超格子ナノワイヤーGaAs/GaP の構造と物性・ 648  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.28  
川村博昭, Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh, 川添良幸
38. Si(001)表面上の Bi 細線の安定性..... 649  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.29  
Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe,  
Tomihiro Hashizume, Masamichi Naito, Ding-Sheng Wang and En-Ge Wang
39. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる状態図計算..... 650  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.30  
佐原亮二, 水関博志, 大野かおる, 久保 紘, 川添良幸

40. 全電子混合基底第一原理プログラム TOMBO の SR8000向け高速化・・・ 651  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.31  
菅野 隆, 安達 斉, Marcel H. F. Sluiter, 川添良幸
41. 量子モンテカルロ法の原子系への応用・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 652  
第1回 日本金属学会東北支部大会(2002.11.13) p.32  
本郷研太, 川添良幸
42. Structure, Stability, and Origin of Bi Dimer Linear Chains on Si(001)  
Surfaces・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 653  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop II  
Tohoku University (2002.11.11-12) p.16 No. II -2  
J. -T. Wang, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, E. G. Wang and D. -S. Wang
43. Theoretical Study of Molecular Enamel Wire Based on  
Polythiophene-Cyclodextrins Inclusion Complex・・・・・・・・・・・・ 654  
KJF2002 (Korea-Japan Joint Forum 2002)  
Organic Materials for Electronics and Photonics  
Tohoku-Gakuin Alumni Association Hall, Sendai (2002.10.22-24) No.O-16  
Hiroyuki Sato, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe
44. Theoretical Study of a Donor-Spacer-Acceptor Structure for a Stable Molecular  
Rectifier・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 655  
KJF2002 (Korea-Japan Joint Forum 2002)  
Organic Materials for Electronics and Photonics  
Tohoku-Gakuin Alumni Association Hall, Sendai (2002.10.22-24) No.Pb-2  
Hiroshi Mizuseki, Kenji Niimura, Chiranjib Majumder and  
Yoshiyuki Kawazoe
45. Bi-induced Line Structures on Si(001) Surfaces・・・・・・・・・・・・ 656  
Asia –Pacific Surface & Interface Analysis Conference  
The University of Tokyo (2002.10.1-4) p.81 No.P-11  
Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Tomihiro Hashizume,  
Masamichi Naitoh, En-Ge Wang and Ding-Sheng Wang

46. シクロデキストリンで被覆したポリチオフェン分子細線の構造と  
電子状態 II ..... 657  
第63回応用物理学会学術講演会 講演予稿集  
新潟大学 (2002.9.24-27) p.1106 No.26p-ZF-5  
佐藤博之, Rodion V. Belosludov, Amir Farajian, 水関博志, 川添良幸
47. ドナー・スパーサー・アクセプター構造をもつ分子による分子整流器の  
理論的考察 ..... 657  
第63回応用物理学会学術講演会 講演予稿集  
新潟大学 (2002.9.24-27) p.1106 No.26p-ZF-6  
新村健二, 水関博志, Chiranjib Majumder, 川添良幸
48. Benzene-1, 4-dithiolate の導電特性計算: 金電極接続の効果 ..... 657  
第63回応用物理学会学術講演会 講演予稿集  
新潟大学 (2002.9.24-27) p.1106 No.26p-ZF-7  
Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸
49. 第一原理計算による単分子デバイス用高分子の設計 ..... 658  
応用物理学会東北支部 第57回学術講演会 講演予稿集  
東北大学 (2002.12.5-6) pp.32-33 No.5pA2  
水関博志, Chiranjib Majumder, 佐藤博之, 新村健二,  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen,  
川添良幸
50. 第一原理計算によるドナー・スパーサー・アクセプター構造をもつ分子整流器  
の機能発現メカニズム解明 ..... 660  
応用物理学会東北支部 第57回学術講演会 講演予稿集  
東北大学 (2002.12.5-6) pp.34-35 No.5pA3  
新村健二, 水関博志, Chiranjib Majumder, 川添良幸
51. 分子絶縁被覆導線のシミュレーション研究 ..... 662  
応用物理学会東北支部 第57回学術講演会 講演予稿集  
東北大学 (2002.12.5-6) pp.36-37 No.5pA4  
佐藤博之, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 水関博志, 川添良幸

52. Theoretical Study on Molecular Enamel Wire Based on Inclusion Complex of Polythiophene-Cyclodextrins..... 664  
第14回日本 MRS 学術シンポジウム  
東京工業大学 (2002.12.20-21) No.PPA-H-470  
Hiroyuki Sato, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
53. Cluster Assembled Nanowire Superlattices of GaAs and GaP..... 665  
第14回日本 MRS 学術シンポジウム  
東京工業大学 (2002.12.20-21) No.PPA-H-552  
Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
54. Quantum Monte Carlo Simulations of Small Systems..... 666  
第14回日本 MRS 学術シンポジウム  
東京工業大学 (2002.12.20-21) No.PPA-H-565  
Kenta Hongo and Yoshiyuki Kawazoe
55. Theoretical Study of a Donor–Spacer–Acceptor Structure for a Stable Molecular Rectifier..... 667  
第14回日本 MRS 学術シンポジウム  
東京工業大学 (2002.12.20-21) No.PPA-H-492  
Kenji Niimura, Hiroshi Mizuseki, Chiranjib Majumder and Yoshiyuki Kawazoe
56. 凍結乾燥法により回収したセメントの強度特性..... 668  
第56回セメント技術大会講演要旨集 2002  
東京 (2002.5.15-17) pp.370-371  
桜田良治, 樋口正典, 丸山久一, 川添良幸
57. 融液成長過程における歪み誘起多結晶化の可能性..... 670  
第32回 結晶成長国内会議 日本結晶成長学会誌  
長野市 (2002.8.1-3) p.146 No.3aB03  
宇治原徹, 藤原航三, 佐崎 元, 宇佐見徳隆, 中嶋一雄

58. ペロフスカイト型 Mn 酸化物の強磁性金属相における  
共鳴非弾性 X 線散乱の理論・・・・・・・・・・・・・・・・ 671  
日本物理学会2002年秋季大会 講演概要集  
中部大学 (2002.9.6-9) 第57巻第2号第3分冊 p. 458 No.6pXA-1  
近藤 浩, 筒井健二, 石原純夫, 前川禎通
59. 強磁性／超伝導／強磁性接合系におけるアンドレーエフ反射の理論 II・ 672  
日本物理学会2002年秋季大会 講演概要集  
中部大学 (2002.9.6-9) 第57巻第2号第3分冊 p. 404 No.8pPSA-29  
山下太郎, 今村裕志, 高橋三郎, 前川禎通
60. 一次元銅酸化物モット絶縁体における非線形光学応答・・・・・・・・ 673  
日本物理学会2002年秋季大会 講演概要集  
中部大学 (2002.9.6-9) 第57巻第2号第4分冊 p. 629 No.7pPSA-68  
高橋 亮, 遠山貴己, 前川禎通
61. リアクト・アンド・ワインド法による CuNb/Nb<sub>3</sub>Sn 超伝導コイルの高電磁力下  
における通電特性・・・・・・・・・・・・・・・・ 674  
第67回 2002年度秋季低温工学・超電導学会 講演概要集  
長崎 (2002.10.30-11.1) p.260 No.3B-p01  
西島 元, 淡路 智, 渡辺和雄, 三好一富, 木村昭夫

<2003 年>

1. The Polaron in a One Dimensional C<sub>60</sub> Crystal・・・・・・・・ 675  
第24回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集  
岡崎 (2003.1.8-10) p.115 No.94(P)  
V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, J. Kudoh and Y. Kawazoe
2. 第一原理計算による分子デバイス設計・・・・・・・・ 676  
第2回 多元物質科学研究所 研究発表会 講演予稿集  
仙台 (2003.1.15) p.6 No.A6  
水関博志, Chiranjib Majumder, 佐藤博之, 新村健二, 菊地良幸  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen,  
川添良幸

3. 分子デバイス用被覆導線の安定構造と電子状態・・・・・・・・・・・・・・・・ 677  
 ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム  
 HPCS2003 論文集  
 東京 (2003.1.20-21) IPSJ Symposium Series Vol.2003, No.4, pp.117-120  
 佐藤博之, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 水関博志, 川添良幸
  
4. ITBL とスーパーSINET ナノテク部会との連携実験・・・・・・・・・・・・ 681  
 第3回 ITBL シンポジウム 講演要旨集  
 東京 (2003.2.17) pp.71-82  
 川添良幸
  
5. Large Scale Computer Simulation Applied to Predict Nanostructured  
 Materials・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 693  
 Abstracts of FIMS 2003 (The 1st International Symposium on  
 "Future-oriented Interdisciplinary Materials Science")  
 Tsukuba (2003.2.28-3.1) pp.43-44  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Hund's Rule in Large Metal Clusters: An ab initio Study of Cu and  
 Ag Clusters・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 695  
 金属材料研究所 第 105 回講演会 春期講演会 (2003.5.29-30) P.16  
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
7. 遷移金属をマルチドープした酸化物半導体薄膜のコンビナトリアル合成と  
 高速物性評価・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 696  
 金属材料研究所 第 105 回講演会 春期講演会 (2003.5.29-30) P.24  
 山田康博, 吉田若菜, 大谷亮, 福村知昭, 大友明, 山本幸生, 長谷川哲也,  
 鯉沼秀臣, Rodion V Belosludov, 西松 毅, 川添良幸, 川崎雅司
  
8. 物理乱数を用いた超大規模モンテカルロシミュレーションによる濾過現象を  
 例とした表面現象へのアプローチ・・・・・・・・・・・・・・・・ 697  
 金属材料研究所 第 105 回講演会 春期講演会 (2003.5.29-30) P.46  
 野手竜之介, 水関博志, 川添良幸

9. 快適なスーパーコンピューティングシステムを目指して..... 698  
金属材料研究所 第 105 回講演会 春期講演会 (2003.5.29-30) P.47  
五十嵐伸昭, 一関京子, 野手竜之介, 伊藤敏行, 鬼頭宣行, 吉田正俊,  
藤田浩三, 川添良幸
10. スーパーコンピューター結合と超大規模シミュレーション計算による  
ナノテクノロジー研究ネットワーク –パラメータサーベイ実証実験–..... 699  
金属材料研究所 第 105 回講演会 春期講演会 (2003.5.29-30) P.48  
一関京子, 三浦重幸, 高橋英明, 豊岡雅人, 安達 斉, 遠藤順一,  
Vijay Kumar, 川添良幸
11. 医療応用を目指したナノテクノロジー研究戦略..... 700  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) 特別講演-1 pp.25-28  
大内憲明, 武田元博, 川添良幸, 佐竹正延, 粕谷厚生
12. The Asian Consortium for Computational Materials Science..... 704  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) シンポジウム 2-2 pp.47-50  
Yoshiyuki Kawazoe, G. P. Das, Bing-Lin Gu and Vijay Kumar
13. 微小ロジウムクラスターの原子構造と磁性..... 708  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.110 No. PaII-2  
裊栄造, 長内弘喜, Vijay Kumar, 川添良幸
14. Absolute *GW* quasiparticle energies of small silicon clusters..... 709  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.111 No. PaII-3  
石井 聡, 大野かおる, Vijay Kumar, 川添良幸
15. Endohedral Silicon Fullerenes..... 710  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.112 No. PaII-4  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

16. 変分モンテカルロ法による2原子分子系への応用..... 711  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.115 No. PaII-7  
本郷研太, 川添良幸
17. Hetero-Peapod with Magic Silicon Clusters..... 712  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.151 No. PpI-12  
Q. Sun, Q. Wang, P. Jena and Y. Kawazoe
18. Mn-Doped Germanium Nanotubes..... 713  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.155 No. PpI-16  
Abhishek K. Singh, Tina M. Briere, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
19. ナノワイヤー超格子 GaAs/GaP の電子状態の解析..... 714  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.156 No. PpI-17  
川村博昭, Vijay Kumar, 川添良幸
20. 第一原理計算と遺伝的アルゴリズムによるナノスケールデバイス設計... 715  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.162 No. PpI-23  
水関博志, 五十嵐伸昭, 菊地良幸, R. V. Belosludov, A. A. Farajian,  
H. Chen, 川添良幸
21. TTTA 結晶の電子状態と反射率スペクトル計算..... 716  
ナノ学会創立大会 講演予稿集  
神戸大学(2003.5.29-31) p.198 No. Pp II -24  
古谷未央, 大野かおる, 川添良幸, 武田 淳
22. Transport Characteristics of CuNb/(Nb,Ti)<sub>3</sub>Sn Superconducting Coil Fabricated  
by React and Wind Method..... 717  
Abstracts of MEM03 (2nd Workshop on Mechano-Electromagnetic  
Property of Composite Superconductors)  
Kyoto University (2003.3.3-5) p.31 No.TP-7  
Gen Nishijima



23. 有機分子による SWNT への電荷ドーピング..... 718  
日本物理学会 第 58 回年次大会 講演概要集  
東北大学, 東北学院大学 (2003.3.28-31)  
第 58 巻第 1 号第 4 分冊 p.801 No.29aZB-7  
高野 琢, 竹延大志, 岩佐義宏, 白石誠司, 阿多誠文
24. 融液・溶液成長過程における歪み誘起多結晶化..... 720  
日本物理学会 第 58 回年次大会 講演概要集  
東北大学, 東北学院大学 (2003.3.28-31)  
第 58 巻第 1 号第 4 分冊 p.873 No.29pYE-4  
宇治原徹

#### 研究会

1. 『金属学会東北支部第一回大会』  
本所講堂 (2002.11.13)  
本センター長が支部長

#### 講演会

1. 『ノーベル化学賞受賞者 ウォルター・コーン教授 講演会』  
本所講堂 (2002.7.24)  
本センター共催

## VI. 新聞記事等

1. 『Ordered Arrays of Aluminum Nanoclusters Grown on Silicon』…………… 723  
MRS Bulletin (2002.5) p.352  
Jinfeng Jia, Jun-Zhong Wang, Xi Liu, Qi-Kun Xue, Zhi-Qiang Li,  
Yoshiyuki Kawazoe and S.B.Zhang
2. 『Materials Design by Simulation』…………… 724  
Asia Science Letter 35 (2002.5) pp.2-3
3. 『共融会幹事の仕事』…………… 725  
研友 第 59 号 (2001-2002) pp.95-96  
川添良幸
4. 『ホヤゲノムとシリコンフラーレンの関係とは？』…………… 727  
こねくと No.7 (2002.4.10)
5. 『ノーベル賞受賞のコーン教授来仙  
—超微小新素材開発で東北大と共同研究へ』…………… 728  
河北新報 (2002.7.25)
6. 『東北大が米大と共同 高度第一原理計算法開発へ』…………… 729  
日刊工業新聞 (2002.7.30)
7. 『ノーベル賞受賞者 ウォルター・コーン教授が来松』…………… 730  
広報まつしま 9月号 No.333 p.4 (2002.9)
8. 『コーン先生講演会報告』…………… 731  
IMR ニュース KINKEN 40 p.6 (2003 WINTER)
9. 『シミュレーションで予言する「未知の物質」』…………… 732  
科学新聞 (2002.12.13)
10. 『片平祭とゆめテク』…………… 733  
東北大学広報 No.214 p.23 (2002.12.15)

11. 『輝く研究第一主義 ー歴史ある鉄鋼研究』…………… 734  
河北新報 (2003.3.26 朝刊)
12. 『スーパーテクニカルサーバー SR8000 G1/64』…………… 735  
はいたっく 通巻 431 号 pp.3-6(2003.4)
13. 『身近な話題でナノテク学ぶ ー宮城一女高で講演会ー』…………… 739  
河北新報 (2003.6.1)
14. 第 103 回 東北大学金属材料研究所 講演会 ポスター…………… 740  
(2002. 5.23-24)
15. ナノ学会創立大会 講演予稿集表紙…………… 741  
神戸大学(2003.5.29-31)

## VII. 雑誌等掲載解説記事

1. 『真空紫外光用レンズ材料のためのペロブスカイト型フッ化物のバンド構造』…………… 742  
応用物理 71 [6] (2002) p.731  
西松 毅, 寺久保憲昭, 水関博志, 川添良幸, Dorota A. Pawlak,  
島村清史, 福田承生
2. 『第1回アジア地区計算材料学コンソーシアム報告』…………… 743  
Boundary 18 [6] (2002.6) pp.26-29  
川添良幸
3. 『Novel Metal Encapsulated Caged Clusters of Silicon』…………… 747  
ナノ学会会報 第1巻 第1号 (2002.10) pp.43-46  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
4. 『材料設計開発への第一原理計算の適用  
ーシミュレーションによる新物質設計の可能性ー』…………… 751  
PETROTECH 26[4] (2003.4) pp.315-318  
川添良幸
5. 『Special Issue on Advances in Computational Materials Science and  
Engineering II -Preface』…………… 755  
Materials Transactions 42 [11] p.2149  
Yoshiyuki Kawazoe and Masanori Kohyama
6. 『導電性ポリマーとシクロデキストリンによるナノテクノロジー用  
被覆導線実現』…………… 756  
ナノ学会会報 第1巻 第2号 (2003.3) pp.67-71  
下村武志, 伊藤耕三, 水関博志, Rodion Belosludov,  
Amir Farajian, Hao Chen, 川添良幸
7. 『クラスター利用ナノ医療』…………… 761  
ナノ学会会報 第1巻 第2号 (2003.3) pp.101-105  
大内憲明, 武田元博, 川添良幸, 佐竹正延, 粕谷厚生

## VIII. 書籍

1. 『シリコンフラーレンを取り巻く新技術』…………… 766  
    図解 ナノテク活用技術のすべて pp.82-85

## IX. 表彰授与

1. 社団法人 日本金属学会『学術功労賞』受賞…………… 770  
    川添良幸 (2003.3.27)

## X. その他

1. 『ナノテクノロジー スパコン連結』…………… 771  
    NEWS ほっとみやぎ (2002.10.9) NHK 放映
2. 『水素吸蔵氷』…………… 771  
    NEWS ほっとみやぎ (2003.3.19) NHK 放映
3. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員…………… 772
4. 計算材料学センター長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧… 773
5. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 776
6. スーパーコンピューター棟レイアウト図…………… 777