

# 2009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

(2009年4月～2010年3月)

### 目 次

『巻頭言』・・・・・・・・・・・・・・・・・・計算材料学センター長 新家光雄

・責任部門の責任・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・川添良幸

#### I. 研究内容概要

1. 第一原理計算および遺伝的アルゴリズムによる分子デバイス用ナノスケール材料の設計 ..... 1  
東北大学金属材料研究所 水関博志

2. BaTiO<sub>3</sub>, PbTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub> の高精度な全エネルギー表面の第一原理計算と分子動力学シミュレーション ..... 3  
東北大学金属材料研究所 西松 毅, 川添良幸  
Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, India  
Umesh V. Waghmare

3. 粉末安息香酸二量体の温度依存テラヘルツ帯振動スペクトルの解釈 ..... 4  
東北大学農学研究科 高橋まさえ ..... 4  
東北大学金属材料研究所 川添良幸  
独立行政法人 理化学研究所 石川陽一, 伊藤弘昌

4.	パーコレーションモデルを用いた電導薄膜の材料設計 (2).....	7
	東北大学未来科学技術共同研究センター 志田和人, MN トリパシ 東北大学金属材料研究所 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸	
5.	全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の結合エネルギー計算 .....	9
	東北大学金属材料研究所 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸 デルフト工科大学 Marcel H. F. Sluiter 横浜国立大学工学部 大野かおる	
6.	Functional Materials Design for Storage, Separation and Medical Applications .....	12
	IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	
7.	Quantum Design of New High Pressurized Materials: Implication in Geo-Materials Science .....	14
	IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe	
8.	Effect of Electron Correlations on Structural Phase Stability, Magnetism and Spin-Dependent Transport in $\text{CeMnNi}_4$ .....	15
	IMR, Tohoku University M. S. Bahramy, Y. Kawazoe Central Electrochemical Research Institute, Kaeaikudi, Tamil Nadu, India P. Murugan, Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Kolkata, India G. P. Das	
9.	Designing Materials for Hydrogen Storage by First-Principles Calculations .....	17
	IMR, Tohoku University Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe	
10.	Doping Effect in $\Sigma 3$ Grain Boundaries of Silicon .....	21
	IMR, Tohoku University Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe	
11.	First-Principles Study on Low Dimensional Materials .....	25
	IMR, Tohoku University G. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	

12. Electronic and Magnetic Properties of Fe Chains on Graphene Nanoribbons ..... 30  
 IMR, Tohoku University Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
13. *Ab-initio* Study of Opto-Electronic Properties of Highly Doped Indium Tin Oxide ..... 32  
 IMR, Tohoku University M. N. Tripathi, R. Sahara, K. Shida, H. Mizuseki  
 and Y. Kawazoe
14. The Current through the Benzene: A First-Principles Study ..... 37  
 IMR, Tohoku University Yunye Liang, Hiroshi Mizuseki,  
 Yoshiyuki Kawazoe  
 Dept. of Physics, Fudan University, Shanghai, China Hao Chen
15. 3d 遷移金属原子のフント第一, 第二経験則解釈の研究 ..... 39  
 東北大学金属材料研究所 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋
16. Molecular Dynamics Simulation Approach to Study Fluid Flow at Nanoscale with  
 the Aid of the Artificial Intelligence Method ..... 43  
 IMR, Tohoku University Samad Ahadian, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
17. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer,  
 Dimers, Trimers, Tetramers and Hexamers on Graphene ..... 46  
 IMR, Tohoku University Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy,  
 Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
18. Structural Information on C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> Gas Hydrate from Quasi-Harmonic Lattice Dynamics ..... 48  
 IMR, Tohoku University Maaouia Souissi, Rodion V. Belosludov,  
 Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe  
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
 Oleg S. Subbotin, Vladimir R. Belosludov
19. Hydrogen Storage Capacity of C<sub>60</sub>(OM)<sub>12</sub> (M=Li and Na) Clusters ..... 49  
 IMR, Tohoku University Qi Peng, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe

20. First Principles Calculation of  $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$  with Acceptor-Like Defects ..... 52  
 IMR, Tohoku University Chan-Yeup Chung, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe  
 Citizen Holdings, Co. LTD. Ritsuko Yaokawa
21. Chromium Doping Effect on V-H System ..... 54  
 National Institute for Materials Science Yoshinori Tanaka  
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
22. Study on  $\text{CO}_2$  Adsorption Mechanism on the Alkaline Earth Oxides ..... 55  
 Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials,  
 Tohoku University K. Wakuta, S. Ueda, R. Inoue, T. Ariyama  
 IMR, Tohoku University R. Belosludov, Y. Kawazoe
23. Graphene Nanoscale Patches (molecules) and Ribbons ..... 57  
 Dept. of Chemistry, University of California at Berkeley, California, USA  
 Michael R Philpott
24. Thermodynamics and Hydrogen Storage Ability of Mixed Hydrogen-Methane  
 Clathrate Hydrate ..... 63  
 Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin,  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
25. 全電子混合基底法第一原理計算による基板上のナノ物質構造の研究 ..... 65  
 独立行政法人 産業技術総合研究所 村上純一  
 独立行政法人 物質・材料研究機構 三木一司, Anirban Bandyopadhyay  
 兵庫県立大学理学部生命理学研究科 重田育照  
 独立行政法人 理化学研究所 飯高敏晃  
 横浜国立大学工学部 大野かおる, 石井聡, Hannes Raebiger
26. Theoretical Study of Phase Transitions in Binary Clathrate Hydrates ..... 68  
 Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia  
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov,  
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

27. Adsorption of Fluorinated C<sub>60</sub> Molecule on Si(111)-7 × 7 Surface ..... 70  
 Central Electrochemical Research Institute, Tamil Nadu, India P. Murugan  
 Dr. Vijay Kumar Foundation, Haryana, India Vijay Kumar  
 Dept. of Physical Electronics, Bashkir State University, Russia  
 R. Z. Bakhtizin,  
 Moscow State University, Dept. of Physics, Moscow, Russia A. I. Oreshkin  
 IMR, Tohoku University J. T. Sadowski, Y. Fujikawa, Y. Kawazoe  
 WPI Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University  
 T. Sakurai
28. Designing Nanogadget for Nanoelectronic Device by Carbon Nanotubes ..... 74  
 Corporate R&D Center, LG Chem, Ltd/Research Park, Moonji-dong,  
 Daejeon, Korea Sang Uck Lee  
 IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Rodion V. Belosludov,  
 Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe  
 G-COE Laboratory, Dept. of Applied Chemistry, Graduate School of  
 Engineering, Tohoku University Fabio Pichierri
29. Nanodesign and Simulations toward Nanoelectronic Device ..... 76  
 Corporate R&D Center, LG Chem, Ltd/Research Park, Moonji-dong,  
 Daejeon, Korea Sang Uck Lee  
 IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
30. The Adsorption of Organic Molecules on Au(111) Surface ..... 78  
 Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials,  
 Tohoku University Yan Feng Zhang  
 IMR, Tohoku University Yong Yang, Yoshiyuki Kawazoe  
 CREST, JST Tadahiyo Komeda

31. Atomistic Nucleation and Growth Mechanism for Single-Wall Carbon Nanotubes  
on Catalytic Nanoparticle Surfaces ..... 80  
 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China  
 Jian-Tao Wang, E. G. Wang Ding-Sheng Wang  
 Dept. of Physics, University of Nevada, Las Vegas, Nevada, USA  
 C. F. Chen  
 Dept. of Physics, Yokohama National University K. Ohno,  
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
32. The Effects of Rotating Magnetic Field on Thermocapillary Flow in a Floating  
Half-Zone ..... 81  
 Dept. of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing, China  
 Z. Zeng, L. P. Yao  
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
33. Extensive Study on Magnetic Properties of Transition-Metal-Doped ZnO Thin Films ..... 85  
 Dept. of Advanced Materials and Nanotechnology, Peking University,  
 Beijing, China Qiang Sun  
 Dept. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA  
 Qian Wang, Puru Jena  
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
34. Theoretical Studies on Hydrogen Storage Nanostructures ..... 88  
 Dept. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA  
 Qian Wang, Puru Jena  
 Dept. of Advanced Materials and Nanotechnology, Peking University, China  
 Qiang Sun  
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
35. First Principles Studies on Carbon Nanostructures ..... 93  
 School of Physics, Madurai Kamaraj University, Madurai, Tamil Nadu, India  
 K. Iyakutti, M. Rajarajeswari, V. J. Surya  
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki, Y. Kawazoe, N. S. Venkataramanan

36. Study of Graphene Nanoribbon Edge-Defect Junction ..... 98  
 Dept. of Physics, Fudan University, Shanghai, China G. Yin, F. Jiang,  
 H. Chen  
 High-end computing center, Fudan University, Shanghai, China P. Wang  
 IMR, Tohoku University Y. Y. Liang, R. Note, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
37. Ferromagnetism in Graphene-Based Nanosheet ..... 104  
 Dept. of Advanced Materials and Nanotechnology, and Center for Applied  
 Physics and Technology, Peking University, Beijing, China J. Zhou, Q. Sun  
 Dept. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA  
 Q. Wang, P. Jena  
 Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Science,  
 Shanghai, China X. S. Chen  
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
38. Functionalization of Carbon Nanotubes with Biological Molecules ..... 106  
 School of Physics, Madurai Kamaraj University, Madurai, Tamil Nadu, India  
 M. Rajarajeswari, K. Iyakutti  
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
39. First Principles Investigation of Hydrogen Storage in Carbon Based Nanostructures ..... 108  
 School of Physics, Madurai Kamaraj University, Madurai, Tamil Nadu, India  
 V. J. Surya, K. Iyakutti  
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
40. 高温超伝導体固有ジョセフソン接合におけるTHz発振 ..... 109  
 東北大学金属材料研究所 小山富男
41. 太陽電池用シリコンバルク多結晶の応力解析 ..... 110  
 東北大学金属材料研究所 高橋 勲, 宇佐美德隆, 沓掛健太朗,  
 森下浩平, 中嶋一雄
42. 有機単結晶電界効果トランジスタからの発光の研究 ..... 113  
 東北大学金属材料研究所 下谷秀和

43. プルトニウム酸化物燃料物性の電子論的研究 ..... 114  
東北大学金属材料研究所 小無健司, 川添良幸, 三宅真紀  
伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 (CTC) 源 聡  
独立行政法人 日本原子力研究開発機構 加藤正人
44. アクチノイド錯体の構造、物性、熱力学諸量に関する量子化学計算 ..... 117  
東北大学金属材料研究所 山村朝雄, 古谷 昌, 大田 卓,  
佐藤伊佐務  
東北大学多元物質科学研究所 桐島 陽
45. 数値シミュレーションを援用した高効率フッ化物単結晶成長技術の構築 ..... 122  
東北大学大学院工学研究科 塚田隆夫  
東北大学金属材料研究所 宍戸統悦
46. FeSiB アモルファスに対する P 添加の影響に関する第一原理 MD ..... 124  
東北大学大学院工学研究科 緒方 真  
東北大 WPI 竹内 章  
東北大学金属材料研究所 Rodion V. Belosludov, 牧野彰宏, 川添良幸,  
井上明久
47. ガス吸蔵材料における安定性評価に関する研究 ..... 129  
独立行政法人 産業技術総合研究所 池庄司民夫, 手塚明則  
独立行政法人 物質・材料研究機構 片桐昌彦, 斎藤繁喜  
東北大学金属材料研究所 佐原亮二
48. 逆工学的アプローチによるナノ物質設計 ..... 131  
弘前大学大学院理工学研究科 種田晃人  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
49. 第一原理分子動力学法によるビーライト ( $C_2S$ ) の結晶構造解析 ..... 134  
秋田工業高等専門学校 桜田良治  
Rice University, Houston, Texas, USA Abhishek Kumar Singh  
太平洋セメント株式会社 鵜沢正美  
東北大学金属材料研究所 川添良幸



50. ナノ炭素磁性の第1原理計算 .....	136
金沢大学理工研究域 齊藤峯雄	
東北大学金属材料研究所 川添良幸	
51. 銅クラスター正イオンの構造転移と反応性変化 .....	138
豊田工業大学 市橋正彦, 寺寄 亨, 近藤 保	
東北大学金属材料研究所 川添良幸	
52. ナノ構造変化・制御によりもたらされる物性の理論解析と予測 .....	140
山口大学メディア基盤センター 赤井光治	
山口大学大学院理工学研究科 仙田康浩, 嶋村修二	
放送大学山口学習センター 松浦 満	
53. ガス吸蔵材料のフォノン・自由エネルギー計算と拡張・応用 .....	141
独立行政法人 物質・材料研究機構 斎藤繁喜	
54. 荷電ロジウム立方クラスターの安定性 .....	142
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India 裊 栄造, Vijay Kumar	
東北大学金属材料研究所 川添良幸	
55. 第一原理計算による THz パラメトリック増幅用 BBO 結晶のフォノン解析 .....	144
大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 猿倉信彦, 清水俊彦	
56. ナノケージ物質の構造と物性に関する研究 .....	145
滋賀県立大学工学部材料科学科 奥 健夫, 角田成明	
独立行政法人 物質・材料研究機構 根城 均	
東京工業大学原子炉工学研究所 尾上 順, 龍崎 奏, 高嶋明人,	
甲斐敏浩	
57. 事前曲げ歪効果の Nb <sub>3</sub> Sn, MgB <sub>2</sub> および Y 系複合超伝導線への適用性に 関する研究 .....	146
岡山大学大学院自然科学研究科 村瀬 暁, 延原正彦, 中島康希	
東北大学金属材料研究所 淡路 智, 西島 元, 渡辺和雄	

58. 軟 X 線集光鏡の変形解析と可変鏡への応用 ..... 149  
 東北大学多元物質科学研究所 豊田光紀, 対馬康平, 柳原美廣
59. 有限要素法による半導体ヘテロエピタキシ層の格子歪解析 ..... 150  
 東北大学学際科学国際高等研究センター 八百隆文
60. Finite Element Analysis of Deformation-Induced Strengthening/Softening  
 of Metallic Glasses by Multistep Indentation ..... 152  
 東北大学国際高等融合領域研究所 Deng Pan
61. ピレンにおける電子励起状態経路の Stone-Wales 転位：反応性と  
 Biradical Character の関係 ..... 154  
 東北大学大学院理学研究科 山崎 馨, 新津直幸, 河野裕彦
62. Theoretical Study of the Terahertz Absorption Spectra of Polymorphism  
 in Crystalline Amino Acids ..... 157  
 Research and Analytical Center for Giant Molecules, Graduate School of  
 Science, Tohoku University Eunsang Kwon  
 Otsuka Electronics Co., Ltd., Yusuke Izutani  
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
63. Atomic Scale Modeling of Small Angle {110} Twist Grain Boundaries in  $\alpha$ -iron:  
 the Structure and Sliding Behavior ..... 160  
 Cyclotron and Radioisotope Center, Tohoku University J. B. Yang,  
 M. Hasegawa  
 The Oarai Center, IMR, Tohoku University Y. Nagai  
 Materials Science and Technology Division, ORNL Yu. N. Osetsky
64. 第一原理計算による多元系バルク金属ガラスの原子構造決定 ..... 165  
 東北大学 WPI 藤田武志, 管 鵬飛, 陳 明偉  
 George Mason University Howard Sheng  
 仙台高等専門学校 今野一弥  
 東北大学金属材料研究所 松浦 真, Wei Zhang, V. Kumar, 井上明久

65. 八面体  $\text{AlH}_6$  を有する水素化物における格子振動特性の解明 ..... 167  
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 佐藤豊人  
東北大学大学院理学研究科 富安啓輔  
高エネルギー加速器研究機構 池田一貴
66.  $\text{K}_4$  Carbon and Related Structures from First Principles Calculations ..... 171  
WPI Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University  
Bin Wen, Tadafumi Adschiri  
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials,  
Tohoku University Seiichi Takami
67. Spin Dependent Electron-Phonon Interaction in  $\text{SmFeAsO}$  ..... 176  
WPI Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University  
Ling Zhang, Pengfei Guan, M. W. Chen  
Dept. of Physics, Fudan University, Shanghai, China D. L. Feng  
Dept. of Physics, University of Science and Technology of China, China  
X. H. Chen  
IMR, Tohoku University S. Maekawa
68. 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO 開発と原子・電子レベルでの理論新材料設計研究 ..... 182  
東北大学金属材料研究所 川添良幸

## II. 原著論文

### < 2009 年 >

1. Probing the Structure, Stability and Hydrogen Adsorption of Lithium Functionalized Isorecticular MOF-5 (Fe, Cu, Co, Ni and Zn) by Density Functional Theory ..... 183  
Int. J. Mol. Sci., **10**[4] (2009) pp.1601-1608  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
2. Structures of Small  $Y_nAl_m$  Clusters ( $n + m$  less than 6): A DFT Study ..... 191  
J. Mol. Structure: THEOCHEM, **902**[1-3] (2009) pp.72-78  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ambigapathy Suvitha, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe
3. Doping Induced Anisotropic Growth in  $C_{60}$  ..... 198  
J. Chem. Phys., **130**[18] (2009) pp.1847141-1847147  
Miao Miao Wu, Qiang Sun, Qian Wang, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe
4. First-Principles Study of Hydrogen Storage over Ni and Rh Doped BN Sheets ..... 205  
Chem. Phys., **359**[1-3] (2009) pp.173-178  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Mohammad Khazaei, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
5. Structures and Reactions of Methanol Molecules on Cobalt Cluster Ions Studied by Infrared Photodissociation Spectroscopy ..... 211  
J. Chem. Phys., **130**[16] (2009) pp.1643041-1643047  
Shinichi Hirabayashi, Ryuji Okawa, Masahiko Ichihashi, Yoshiyuki Kawazoe and Tamotsu Kondow
6. A Combined Experimental and Theoretical Investigation on the Oxygenation of Organic Sulfides by Oxo(salen)chromium(V) Ion ..... 218  
J. Phys. Organic Chem., **22**[7] (2009) pp.650-660  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Seenivasan Rajagopal, Ambigapathy Suvitha and Yoshiyuki Kawazoe

7. Evaluation of the Cox Equation to Derive Dynamic Contact Angle at Nanopores  
Imbibition: A Molecular Dynamics Study ..... 229  
Mater. Trans., **50**[5] (2009) pp.1157-1160  
S. Ahadian and Y. Kawazoe
  
8. Functionalization of Single-Walled Carbon Nanotube with Borane for Hydrogen  
Storage ..... 233  
Physica E, **41**[7] (2009) pp.1340-1346  
V. J. Surya, K. Iyakutti, M. Rajarajeswari and Y. Kawazoe
  
9. Edge Versus Interior in the Chemical Bonding of Graphene Materials ..... 238  
Phys. Rev. B, **79**[23] (2009) pp.2333031-2333034  
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. First-Principles Calculations of Hyperfine Structure in *M*-doped Si<sub>16</sub>H<sub>16</sub> Fullerene  
Cages (*M*=Cr, Mn, and Fe) ..... 242  
Phys. Rev. B, **79**[23] (2009) pp.2354431-2354437  
Mohammad Saeed Bahramy, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. A Molecular Dynamics Approach to Examine the Kinetics of the Capillary  
Imbibition of a Polymer at Nanoscale ..... 249  
Colloid Polym. Sci., **287**[8] (2009) pp.961-967  
S. Ahadian and Y. Kawazoe
  
12. Quantum Chemistry of Quantum Dots: Effects of Ligands and Oxidation ..... 258  
J. Chem. Phys., **131**[4] (2009) pp.0441061-0441066  
Talgat M. Inerbaev, Artëm E. Masunov, Saiful I. Khondaker,  
Alexandra Dobrinescu, Andrei-Valentin Plamadă and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Polarization Rotation, Switching, and Electric-Field–Temperature Phase Diagrams  
of Ferroelectric BaTiO<sub>3</sub>: A Molecular Dynamics Study ..... 264  
Phys. Rev. B, **80**[2] (2009) pp.0241071-0241076  
Jaita Paul, Takeshi Nishimatsu, Yoshiyuki Kawazoe and Umesh V. Waghmare

14. An Artificial Intelligence Approach for Modeling and Prediction of Water Diffusion Inside a Carbon Nanotube ..... 270  
 Nanoscale Res. Lett., **4**[9] (2009) pp.1054-1058  
 Samad Ahadian and Yoshiyuki Kawazoe
15. ヘマトポルフィリンとそのダイマーの TDDFT 計算 ..... 275  
 日本金属学会誌, **73**[8] (2009) pp.555-558  
 A. Suvitha, R. V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸, 武田元博, 河野雅弘, 大内憲明
16. Role of Valence Electrons for Formation of Glassy Alloys ..... 279  
 J. Alloys Compd., **483**[1-2] (2009) pp.623-626  
 Mikio Fukuhara, Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe and Akihisa Inoue
17. Inducing Different Functional Properties to the External and Internal Surfaces of Single Walled Carbon Nanotubes ..... 283  
 J. Comput. Theor. Nanosci., **6**[7] (2009) pp.1468-1473  
 M. Rajarajeswari, K. Iyakutti, M. W. C. Dharma-Wardana and Y. Kawazoe
18. Interpretation of Temperature-Dependent Low Frequency Vibrational Spectrum of Solid-State Benzoic Acid Dimer ..... 289  
 Chem. Phys. Lett., **479**[4-6] (2009) pp.211-217  
 Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe, Yoichi Ishikawa and Hiromasa Ito
19. Geometrical Indications of Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphite Producing Star and Ellipsoidal Like Features in Scanning Tunneling Microscopy Images: *Ab Initio* Study ..... 296  
 Carbon, **47**[14] (2009) pp.3306-3312  
 Mohammad Khazaei, Mohammad Saeed Bahramy, Ahmad Ranjbar, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

- 20 Theoretical Study of Phase Transitions in Kr and Ar Clathrate Hydrates from Structure II to Structure I Under Pressure ..... 303  
 J. Chem. Phys., **131**[11] (2009) pp.1145071-1145078  
 Oleg S. Subbotin, Tatiana P. Adamova, Rodion V. Belosludov,  
 Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Jun-ichi Kudoh, P. M. Rodger  
 and Vladimir R. Belosludov
21. Clustering of Functional Molecules on a Single-Walled Carbon-Nanotube Surface and its Effect on Hydrogen Storage ..... 311  
 Phys. Status Solidi, B., **246**[10] (2009) pp.2248-2256  
 K. Iyakutti, V. J. Surya, M. Rajarajeswari, N. S. Venkataramanan and  
 Y. Kawazoe
22. Adsorption and Electronic Structure of Single  $C_{60}F_{18}$  Molecule on Si(1 1 1)- $7 \times 7$  Surface ..... 320  
 Chem. Phys. Lett., **482**[4-6] (2009) pp.307-311  
 R. Z. Bakhtizin, A. I. Oreshkin, P. Murugan, Vijay Kumar, J. T. Sadowski,  
 Y. Fujikawa, Y. Kawazoe and T. Sakurai
23. Ferromagnetism in Semihydrogenated Graphene Sheet ..... 325  
 Nano Lett., **9**[11] (2009) pp.3867-3870  
 J. Zhou, Q. Wang, Q. Sun, X. S. Chen, Y. Kawazoe and P. Jena
24. Comprehensive Study of Sodium, Copper, and Silver Clusters Over a Wide Range of Sizes  $2 \leq N \leq 75$  ..... 329  
 J. Chem. Phys., **131**[17] (2009) pp.17451001-17451019  
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar, Tadafumi Adschiri and Yoshiyuki Kawazoe
25. Experimental and Theoretical Investigations on the Epitaxial Growth of 4, 4'-Stilbenedicarboxylic Acid Molecules on Au(111) ..... 348  
 J. Chem. Phys., **131**[17] (2009) pp.1747061-1747065  
 Yan Feng Zhang, Yong Yang, Yoshiyuki Kawazoe and Tadahiro Komeda

26. An Efficient Tool for Modeling and Predicting Fluid Flow in Nanochannels ..... 353  
 J. Chem. Phys., **131**[18] (2009) pp.1845061-1845067  
 Samad Ahadian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Hydrogen Storage Capacity of  $C_{60}(OM)_{12}$  (M=Li and Na) Clusters ..... 360  
 J. Chem. Phys., **131**[21] (2009) pp.2145051-2145058  
 Qi Peng, Gang Chen, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
28. Bonding and Magnetism in Nanosized Graphene Molecules: Singlet States of Zigzag Edged Hexangulenes  $C_{6m}H_{6m}$  ( $m=2, 3, \dots, 10$ ) ..... 368  
 J. Chem. Phys., **131**[21] (2009) pp.21470601-21470612  
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
29. Chemical Engineering of Prehydrogenated C and BN-Sheets by Li: Application in Hydrogen Storage ..... 380  
 J. Appl. Phys., **106**[9] (2009) pp.943031-943035  
 Mohammad Khazaei, Mohammad Saeed Bahramy,  
 Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
30. Diffuse and Doubly Split Atom Occupation in Hexagonal  $LiBH_4$  ..... 385  
 Appl. Phys. Lett., **95**[22] (2009) pp.2219011-2219013  
 Tamio Ikeshoji, Eiji Tsuchida, Kazutaka Ikeda, Motoaki Matsuo, Hai-Wen Li,  
 Yoshiyuki Kawazoe and Shin-ichi Orimo
31. Designing Nanogadgets for Nanoelectronic Devices with Nitrogen-Doped Capped Carbon Nanotubes ..... 388  
 small, **5**[15] (2009) pp.1769-1775  
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
32. Polarization-Induced Switching Effect in Graphene Nanoribbon Edge-Defect Junction ..... 395  
 J. Chem. Phys., **131**[23] (2009) pp.2347061-2347067  
 G. Yin, Y. Y. Liang, F. Jiang, H. Chen, P. Wang, R. Note, H. Mizuseki and  
 Y. Kawazoe



33. Accurate Description of Phase Diagram of Clathrate Hydrates at the Molecular Level ..... 402  
 J. Chem. Phys., **131**[24] (2009) pp.24451001-24451012  
 Rodion V. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Hiroshi Mizuseki,  
 Yoshiyuki Kawazoe and Vladimir R. Belosludov
34. Conductivity Percolation on a Square Lattice with Two Different Sizes of Particles ..... 414  
 Mater. Trans., **50**[12] (2009) pp.2848-2851  
 Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, M. N Tripathi, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
35. Hydrogen Storage on Nanofullerene Cages ..... 418  
 NANO, **4**[5] (2009) pp.253-263  
 Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
36. THz Wave Emission from the Intrinsic Josephson Junctions of High  $T_c$   
 Superconductors ..... 429  
 J. Phys. Conf. Ser., **150**[5] (2009) pp.0521561-0521564  
 H. Matsumoto, T. Koyama, M. Machida and K. Kadowaki
37. In-Phase Electrodynamics and Terahertz Wave Emission in Extended Intrinsic  
 Josephson Junctions ..... 433  
 Phys. Rev. B., **79**[10] (2009) pp.10452201-10452212  
 Tomio Koyama, Hideki Matsumoto, Masahiko Machida and Kazuo Kadowaki
38. Angular Dependence of Emitted THz Waves from In-Phase Intrinsic Josephson  
 Junctions ..... 445  
 Physica C, **469**[15-20] (2009) pp.1600-1603  
 H. Matsumoto, T. Koyama and M. Machida
39. The First-Principles Calculation of Molecular Conduction ..... 449  
 Front. Phys. China, **4**[3] (2009) pp.327-336  
 Hao Chen

40. Quantization of the Frank–Bilby Equation for Misfit Dislocation Arrays in Interfaces ..... 459  
 Acta Mater., **57**[16] (2009) pp.4874-4881  
 J. B. Yang, Y. Nagai, Z. G. Yang and M. Hasegawa
41. Shape Deformation by Moving a Glissile Interface with One Set of Misfit Dislocations ..... 467  
 Philos. Mag. Lett., **89**[10] (2009) pp.605-613  
 J. B. Yang, Z. G. Yang, Y. Nagai and M. Hasegawa
42. Atomic Level Structure in Multicomponent Bulk Metallic Glass ..... 476  
 Phys. Rev. Lett., **102**[24] (2009) pp.2455011-2455014  
 Y. Q. Cheng, E. Ma and H. W. Sheng
43. Atomic-Scale Heterogeneity of a Multicomponent Bulk Metallic Glass with Excellent Glass Forming Ability ..... 480  
 Phys. Rev. Lett., **103**[7] (2009) pp.0755021-0755024  
 T. Fujita, K. Konno, W. Zhang, V. Kumar, M. Matsuura, A. Inoue, T. Sakurai and M. W. Chen
44. Nature of Atomic Bonding and Atomic Structure in the Phase-Change  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_3$  Glass .... 484  
 Phys. Rev. Lett., **103**[19] (2009) pp.1955021-1955024  
 M. Xu, Y. Q. Cheng, H. W. Sheng and E. Ma
45. Design Study of Two-Aspherical-Mirror Anastigmat with Reduced Sensitivities to Misalignments: Correction of Higherorder Aberrations ..... 488  
 J. Phys. Conf. Ser., **186**[1] (2009) pp.0120761-0120763  
 M. Toyoda and M. Yanagihara
46. Si-Doping Effect on Bonding Nature and Elasticity of  $\text{AlMB}_{14}$  with  $M=\text{Li, Mg, and Na}$  .... 491  
 J. Phys. Conf. Ser., **176**[1] (2009) pp.0120181-0120188  
 Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudo, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe

47. Thermodynamics and Hydrogen Storage Ability of Binary Hydrogen + Help Gas  
Clathrate Hydrate ..... 499  
Int. J. Nanosci., **8**[1-2] (2009) pp.57-63  
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe  
and J. Kudoh

< 2010 年 >

1. Reducible and Non-Reducible Defect Clusters in Tin-Doped Indium Oxide ..... 506  
Solid State Commun., **150**[1-2] (2010) pp.18-21  
Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and  
Takashi Nakamura
2. Correlation Between Microhardness and Electronic Charge Density of Hafnium  
Hydrides ..... 510  
J. Alloys Compd., **489**[2] (2010) pp.685-688  
B. Tsuchiya, R. Sahara, M. Oku, K. Konashi, S. Nagata, T. Shikama,  
H. Mizuseki and Y. Kawazoe
3. Tuning Magnetic Properties of Mn<sub>4</sub> Cluster with Gold Coating ..... 514  
Phys. Chem. Chem. Phys., **12**[7] (2010) pp.1493-1496  
Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
4. Phase Stability of Carbon Clathrates at High Pressure ..... 518  
J. Appl. Phys., **107**[6] (2010) pp.0635071-0635074  
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Ding-Sheng Wang, H. Mizuseki and  
Y. Kawazoe
5. Atomistic Nucleation and Growth Mechanism for Single-Wall Carbon Nanotubes  
on Catalytic Nanoparticle Surfaces ..... 522  
Nanotechnology, **21**[11] (2010) pp.1156021-1156025  
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Kaoru Ohno, Enge Wang, Xiao-Long Chen,  
Ding-Sheng Wang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

6. First-Principles Study on Hydrogen Storage in Single Walled Carbon Nanotube Functionalized with Ammonia ..... 527  
 J. Comput. Theor. Nanosci., **7**[3] (2010) pp.552-557  
 V. J. Surya, K. Iyakutti, M. Rajarajeswari and Y. Kawazoe
  
7. The Role of Li and Ni Metals in the Adsorbate Complex and their Effect on the Hydrogen Storage Capacity of Single Walled Carbon Nanotubes Coated with Metal Hydrides, LiH and NiH<sub>2</sub> ..... 533  
 Int. J. Hydrogen. Energy, **35**[6] (2010) pp.2368-2376  
 V. J. Surya, K. Iyakutti, N. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
8. Atomic Scale Modeling of {110} Twist Grain Boundaries in  $\alpha$ -ion: Structure and Energy Properties ..... 542  
 Philos. Mag., **90**[7-8] (2010) pp.991-1000  
 J. B. Yang, Y. Nagai, M. Hasegawa and Yu. N. Osetsky
  
9. A Crystallographic Model of fcc/bcc Martensitic Nucleation and Growth ..... 552  
 Acta Mater., **58**[5] (2010) pp.1599-1606  
 J. B. Yang, Z. G. Yang, Y. Nagai and M. Hasegawa
  
10. Use of the Frank–Bilby Equation for Calculating Misfit Dislocation Arrays in Interfaces ..... 560  
 Scr. Mater., **62**[7] (2010) pp.458-461  
 J. B. Yang, Y. Nagai and M. Hasegawa
  
11. Relationship between Grain Boundary Structures in Si Multicrystals and Generation of Dislocations During Crystal Growth ..... 564  
 J. Appl. Phys., **107**[1] (2010) pp.0135111-0135115  
 Noritaka Usami, Ryusuke Yokoyama, Isao Takahashi, Kentaro Kutsukake, Kozo Fujiwara and Kazuo Nakajima

12. Generation Mechanism of Dislocations During Directional Solidification of Multicrystalline Silicon Using Artificially Designed Seed ..... 569  
J. Cryst. Growth, **312**[7] (2010) pp.897-901  
Isao Takahashi, Noritaka Usami, Kentaro Kutsukake, Gaute Stokkan, Kohei Morishita and Kazuo Nakajima
13. Global Analysis of Heat Transfer in CZ Crystal Growth of Oxide Taking into Account Three-Dimensional Unsteady Melt Convection: Investigation of the Coupling Method between 2D and 3D Models ..... 574  
J. Cryst. Growth, **312**[7] (2010) pp.997-1004  
T. Tsukada, K.-I.Sugioka, C. J. Jing and M. Kobayashi

### Ⅲ. 国際会議発表論文

#### < 2009 年 >

1. Theoretical Research for Improved Hydrogen Storage Materials ..... 583  
The 4<sup>th</sup> China-Japan Seminar on Hydrogen Storage Materials  
Guangzhou, China (2009.4.10-14) p.73 (Oral)  
H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara and Y. Kawazoe
  
2. Hydrogen Storage in Hydride Coated Single Walled Carbon Nanotubes ..... 584  
ONR/ONR-Global — Alternative/Renewable Energy Solutions for Island  
Environments Pacific Forum —  
Kyoto, Japan (2009.5.25-27)  
K. Iyakutti
  
3. Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-Electron  
Mixed-Basis Program TOMBO ..... 585  
E-MRS 2009 Spring Meeting  
Strasbourg, France (2009.6.8-12)  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and  
Yoshiyuki Kawazoe
  
4. First-Principles Study of Guest-Atom Effects on Electronic Structure and  
Thermoelectric Properties in Clathrate Semiconductors ..... 586  
28th International Conference / 7th European Conference on Thermoelectrics  
(ICT2009ECT)  
Freiburg, Germany (2009.6.26-30) p.201, No.PT-115  
K. Akai, K. Kishimoto, Y. Kono, S. Yamamoto, H. Takagi and T. Koyanagi
  
5. Hydrogen Induced Magnetism on Graphene: A First-Principles Study ..... 587  
The International Conference on Magnetism - ICM 2009  
Karlsruhe, Germany (2009.7-26-31) p.245, No.Tu-D-3.3-22 (Poster)  
Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe

6. First Principles Calculations to Improved Hydrogen Storage Properties of Materials ..... 588  
 Russian-Japanese Workshop (review conference) “State of Materials Research  
 and New Trends in Material Science”  
 Novosibirsk, Russia (2009.8.3-5) p.19 (Oral)  
 H. Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara and Y. Kawazoe
  
7. Theoretical Study of Transport in One-Dimension Nanosystems for Application in  
 Molecular Electronics ..... 589  
 Russian-Japanese Workshop (review conference) “State of Materials Research  
 and New Trends in Material Science”  
 Novosibirsk, Russia (2009.8.3-5) p.31 (Oral)  
 R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, O. K. Miki, T. Takenobu, Y. Iwasa  
 and Y. Kawazoe
  
8. Hydrogen Hydrates as Energy Storage Materials ..... 590  
 Russian-Japanese Workshop (review conference) “State of Materials Research  
 and New Trends in Material Science”  
 Novosibirsk, Russia (2009.8.3-5) p.36 (Oral)  
 V. R. Belosludov
  
9. Accurate Description of Interactions in Hydrogen Clathrate: Role of Help Gas on  
 Stability of Hydrate Framework ..... 591  
 Russian-Japanese Workshop (review conference) “State of Materials Research  
 and New Trends in Material Science”  
 Novosibirsk, Russia (2009.8.3-5) p.55 (Poster)  
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov and  
 Y. Kawazoe
  
10. Calculation of the Hydrogen and Methane Content in Mixed Hydrogen-Methane  
 Hydrates in Dependence on Gas Mixture Composition ..... 592  
 Russian-Japanese Workshop (review conference) “State of Materials Research  
 and New Trends in Material Science”  
 Novosibirsk, Russia (2009.8.3-5) p.90 (Poster)  
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

11. The Electronic and Optical Properties of the Oxidized Indium Tin Oxide: A First Principles Study ..... 593  
 The 2nd Photonics and Opto-Electronics Meetings (POEM 2009)  
 Wuhan, China (2009.8.8-10)  
 M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. First-Principles Calculation of Beta-Form Belite Substituted with Trace Impurity ..... 594  
 34<sup>th</sup> Conference on OUR WORLD IN CONCRETE & STRUCTURES  
 Singapore (2009.8.16-18) pp.297-304  
 R. Sakurada, A. K. Singh, M. Uzawa and Y. Kawazoe
  
13. *Ab Initio* Study of the Alkali Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Material  
 The 238th ACS Fall 2009 National Meeting & Exposition ..... 602  
 Washington, DC, USA (2009.8.16-20) No.FUEL67  
 Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Phonon and Thermodynamic Properties of LaNi<sub>5</sub>-H: First Principles Calculations ..... 603  
 EuropaCat IX — Catalysis for a Sustainable World —  
 Salamanca, Spain (2009.8.30-9.4)  
 M. Katagiri and S. Saito
  
15. Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials MOF by All Electron  
 Mixed-Basis Program TOMBO ..... 604  
 13th International Conference on the Applications of Density Functional  
 Theory in Chemistry and Physics  
 Lyon, France (2009.8.31-9.4) p.310, No.P818  
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
16. First Principles Studies of the Adsorption of Uracil on SWCNTs ..... 605  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.64, O3-1 (Oral)  
 M. Rajarajeswari, K. Iyakutti and Y. Kawazoe



17. Single Walled Carbon Nanotubes Coated with Hydrides as Hydrogen Storage  
 Medium ..... 606  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.82, O6-1 (Oral)  
 K. Iyakutti, V. J. Surya and Y. Kawazoe
18. Paradigm Shift of Materials Design by Computer Simulation from Explanation to  
 Prediction ..... 607  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.102, K11-1 (Keynote)  
 Y. Kawazoe
19. Interpretation of Hund's First and Second Rules for 3d Atoms ..... 608  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.134, P-5 (Poster)  
 Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
20. Effect of Edge Doping on Electronic and Magnetic Properties of Graphene  
 Nanoribbons ..... 609  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.145, P-16 (Poster)  
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani  
 and Yoshiyuki Kawazoe
21. An Efficient Tool for Modeling and Prediction of Fluid Flow in Nanochannels ..... 610  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.152, P-23 (Poster)  
 S. Ahadian and Y. Kawazoe

22. Another SP<sup>3</sup> Bonded Carbon Crystal ..... 611  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.164, P-35 (Poster)  
K. Iyakutti, M. Rajarajeswari and Y. Kawazoe
23. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer,  
Dimers, Trimers and Tetramers on Graphen ..... 612  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.190, P-61 (Poster)  
A. Ranjbar, M. S. Bahramy, M. Khazaei, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
24. Influence of Methane Content on Clathrate Hydrate Structure Transformation sI – sII ..... 613  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.197, P-68 (Poster)  
O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki  
and Y. Kawazoe
25. Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials by All-Electron  
Mixed-Basis Program TOMBO ..... 614  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.203, P-74 (Poster)  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter  
and Yoshiyuki Kawazoe
26. Theoretical Investigation of the Hydrogen Storage Ability of a Carbon Nanohorn ..... 615  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.205, P-76 (Poster)  
G. Chen, Q. Peng, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

27. First Principles Calculations on Grain Boundary Impurities in Polycrystalline Silicon ..... 616  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.206, P-77 (Poster)  
Ambigapathy Suvitha, N. S. Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe
28. Atomistic Modelling of Artificially Controlled Grain Boundaries in Multicrystalline  
Silicon ..... 617  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.207, P-78 (Poster)  
Hiroshi Mizuseki, Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara  
and Yoshiyuki Kawazoe
29. First-Principles Calculations on Hydrogen Storage Properties of CS-4 Clathrate  
Hydrate ..... 618  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.211, P-82 (Poster)  
Maaouia Souissi, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
30. Density Functional Study on the Alkali Atom Doped Calix[4]arene as Hydrogen  
Storage Material ..... 619  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.212, P-83 (Poster)  
N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
31. Opto-Electronic and Magnetic Properties of the Mn-Doped Indium in Oxide:  
A First-Principles Study ..... 620  
The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
(ACCMS5)  
Hanoi (2009.9.7-11) p.234, P-105 (Poster)  
Madhvendra Nath Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

32. Giant Moment Reduction of Fe Impurity in Dilute Pd-V Alloys ..... 621  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.238, P-109 (Poster)  
 M. S. Bahramy, S. N. Mishra, G. P. Das and Y. Kawazoe
33. The Motion Behavior of Li Atom in LiBH<sub>4</sub> Low Temperature Phase, High  
 Temperature Phase, and the Intermediate State Structures ..... 622  
 The 5th Conference of Asian Consortium on Computational Materials Science  
 (ACCMS5)  
 Hanoi (2009.9.7-11) p.244, P-115 (Poster)  
 Qi Peng and Yoshiyuki Kawazoe
34. First-Principles Study on Crystal Structure of Beta-Form Belite ..... 623  
 APT 2009 -The Fourth Asian Particle Technology Symposium-  
 New Delhi, India (2009.9.14-16) pp.691-696  
 R. Sakurada, A. K. Singh, M. Uzawa and Y. Kawazoe
35. Transport Properties of Quantum Wires by First-Principles Calculations ..... 629  
 IWSP-2009 — 4<sup>th</sup> International Workshop on Surface Physics Surfaces and  
 Nanostructures —  
 Poland (2009.9.20-25) p.30 (Invited)  
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe
36. A Computational Investigation of Relationship Between Shear Stress and  
 Multicrystal Structure in Si ..... 630  
 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials  
 (SSDM2009)  
 Sendai, Japan (2009.10.6-9) No.H-9-5 (Oral)  
 Isao Takahashi, Noritaka Usami, Kentaro Kutsukake, Kohei Morishita and  
 Kazuo Nakajima

37. First Principles Calculations on  $\Sigma 3$  Grain Boundary Impurities in Polycrystalline Silicon ..... 632  
 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2009)  
 Sendai, Japan (2009.10.6-9) pp.755-756, No.P-14-11 (Poster)  
 Ambigapathy Suvitha, N. S. Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
38. From Explanation to Prediction – Paradigm Shift of Theoretical Materials Design – ..... 634  
 Supergreen 2009 – International Conference of Supercritical Fluid –  
 Tohoku Univ., Sendai, Japan (2009.10.15-17) No.12-102 (Invited)  
 Yoshiyuki Kawazoe
39. Paradigm Shift of Materials Design by Computer Simulation – from Explanation to Prediction – ..... 635  
 3rd International Symposium on Nanomedicine (ISNM2009-2)  
 Okazaki, Japan (2009.11.4-6) p.26, No.O-5-04 (plenary talk)  
 Y. Kawazoe
40. Artificially Controlled Grain Orientation in Bicrystalline Silicon: A Computational Study ..... 636  
 19th International Photovoltaic Science and Engineering Conference and Exhibition – PVSEC-19 –  
 Jeju, Korea (2009.11.9-13) p.295, No.CSI-P4-39  
 Hiroshi Mizuseki, Suvitha Ambigapathy, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
41. First Principles Calculations on Grain Boundary Impurity in Polycrystalline Silicon ..... 636  
 19th International Photovoltaic Science and Engineering Conference and Exhibition – PVSEC-19 –  
 Jeju, Korea (2009.11.9-13) p.347, No.ASI-P5-12  
 Suvitha Ambigapathy, Venkataramanan Natarajan Sathiyamoorthy, Sahara Ryoji, Mizuseki Hiroshi and Kawazoe Yoshiyuki

42. Metal-Organic Framework Materials for Stereo-Selective Separation: Theoretical Study ... 637  
 The 3rd International Congress of Nanobiotechnology & Nanomedicine  
 (2009 nanobio)  
 San Francisco, USA (2009.6.22-24) No.W-B-2 (Oral)  
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
43. First Principles Calculations of Phonon and Thermodynamic Properties of Hydrogen  
 Storage  $\alpha$ -LaNi<sub>5</sub>H ..... 638  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.W3-1 (Poster)  
 (Mater. Res. Soc. Symp. Proc., (2010) 1216-W03-01)  
 Shigeki Saito, Masahiko Katagiri, Vasileios Tserolas, Jun Nakamura,  
 Hidehiro Onodera and Hiroshi Ogawa
44. Phonon of DNA by Numerical Model Using First-Principles Potentials ..... 644  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.CC7.5 (Poster)  
 S. Saito, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
45. Theoretical Study of ZnO Nanoparticles: Stable Onion – Like Configurations ..... 645  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.H7.10 (Oral)  
 R. Belosludov, H. Mizuseki, A. Dmytruk, I. Dmitruk and A. Kasuya
46. Multiphysics Modeling of Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon ..... 646  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.LL5.6 (Poster)  
 H. Mizuseki, A. Suvitha, R. Sahara and Y. Kawazoe
47. First Principle Calculations on Impurity Effect in Silicon Grain Boundary ..... 647  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.Q8.9 (Poster)  
 H. Mizuseki, A. Suvitha, N. Venkataramanan, R. Sahara and Y. Kawazoe

48. First Principles Calculations on Storage Capacity of Hydrogen Storage Materials ..... 648  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.W1.7 (Oral)  
 H. Mizuseki, N. Venkataramanan, R. Sahara, Y. Kawazoe
49. Theoretical Study of Hydrogen Storage in Clathrate Hydrate ..... 649  
 2009 MRS Fall Meeting  
 Boston, USA (2009.11.30-12.4) No.W8.40 (Poster)  
 R. Belosludov, O. Subbotin, H. Mizuseki, V. Belosludov and Y. Kawazoe
50. Theoretical Study of the Terahertz Absorption Spectra of the Polymorphism  
 in Molecular Crystals ..... 651  
 International Workshop on Terahertz Technology 2009 (TeraTech '09)  
 Osaka, Japan (2009.11.30-12.3) No.1P-30 (Poster)  
 Eunsang Kwon, Yusuke Izutani, Hidetoshi Oikawa and Hachiro Nakanishi
51. Binding Energy Estimation of Hydrogen Storage Materials MOF by All-Electron  
 Mixed-Basis Program TOMBO ..... 652  
 19<sup>th</sup> Academic Symposium of MRS-Japan 2009  
 Yokohama, Japan (2009.12.7-9) No.J-10 (Oral)  
 R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno and Y. Kawazoe
- < 2010 年 >
1. Bonding and Magnetism of Graphene Nano Patches and Ribbons ..... 653  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
 Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Inv-1  
 Michael R Philpott, Sinisa Vukovic, William A. Lester Jr, and  
 Yoshiyuki Kawazoe

2. Transport Controlled by Transverse Electric Field in Graphene Nanoribbon with Edge-Defect Junction ..... 655  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Inv-2  
 G. Yin, Y. Y. Liang, F. Jiang, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
3. Adsorption of Fluorinated C<sub>60</sub> Molecule on Si(111)-7 × 7 Surface ..... 655  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Inv-12  
 P. Murugan, Vijay Kumar, R. Z. Bakhtizin, A. I. Oreshkin, J. T. Sadowski, Y. Fujikawa, Y. Kawazoe and T. Sakurai
  
4. The Effect of Rotating Magnetic Field on Thermocapillary Flow: Comparison of the Infinite and the Φ1-Φ2 Models ..... 656  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Inv-18  
 Liping Yao, Zhong Zeng, Chaobo Chen, Yongxiang Zhang, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
5. Investigation of Hydrogen Storage in Carbon Based Nanostructures Coated with Light Weight Hydride, BH<sub>3</sub> ..... 657  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Inv-22  
 K. Iyakutti, V. J. Surya, I. Lakshmi, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe



6. Size Evolution of Structures and Oxidation Activity in Copper Cluster Cations ..... 658  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.Oral-10  
Masahiko Ichihashi, Shinichi Hirabayashi, Yoshiyuki Kawazoe and  
Tamotsu Kondow
  
7. A Computational Approach to Study Proton Transfer in Perfluorosulfonic Acid  
Membranes ..... 659  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-1  
Samad Ahadian, Ahmad Ranjbar, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
8.  $\pi$  - Stacking Interaction between Carbon Nanotubes and Nucleic Acid Bases ..... 660  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-2  
M. Rajarajeswari, K. Iyakutti, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
9. Electronic and Magnetic Properties of Fe Chains on Graphene Nanoribbons ..... 661  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-4  
N. Gorjizadeh and Y. Kawazoe
  
10. Microstructures and Optical Properties Spherical Silicon Solar Cells ..... 662  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-8  
Hiroki Kidowaki, Hirokazu Yada, Nariaki Kakuta, Takeo Oku,  
Atsushi Suzuki, Kenji Kikuchi, Youichi Kanamori and Mikio Murozono

11. Possibility of Condensed Cluster Nuclear Fusion in Hydrogen Storage Pd-Based Alloys ..... 663  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-9  
 Takuya Kitao, Takeo Oku, Atsushi Suzuki and Kenji Kikuchi
12. A genetic Algorithm for the Structure Optimization of Binary Atomic Cluster ..... 664  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-16  
 Akito Taneda and Yoshiyuki Kawazoe
13. High Pressure Polytypes of MgC<sub>2</sub> Predicted by First-Principles Calculations ..... 665  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-19  
 Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri
14. First-Principles Calculations on Hydrogen Storage Properties of CS-4 Clathrate Hydrate ..... 666  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-20  
 Maaouia Souissi, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
15. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer, Dimers, Trimers, Tetramers and Hexamers on Graphene ..... 667  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-21  
 Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki, and Yoshiyuki Kawazoe

16. Accurate Potential Surfaces of Zone-Center Distortions for BaTiO<sub>3</sub>, PbTiO<sub>3</sub> and SrTiO<sub>3</sub> ..... 668  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-22  
 Takeshi Nishimatsu, Yoshiyuki Kawazoe and Umesh Waghmare
17. DFT Calculation of Electronic Properties for Disordered-type Langasite Piezoelectric Crystal La<sub>3</sub>Ta<sub>0.5</sub>Ga<sub>5.5</sub>O<sub>14</sub> ..... 669  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-23  
 Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
18. *Ab Initio* Simulation of Chemical CO<sub>2</sub> Adsorption Process ..... 670  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-25  
 K. Wakuta, S. Shigeru, R. Inoue, R. Belosludov, Y. Kawazoe and T. Ariyama
19. Computational Study of Nature of Interaction of Functional Adsorbates and Molecular Hydrogen Binding with Single Walled Carbon Nanotubes ..... 671  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-26  
 V. J. Surya, K. Iyakutti, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
20. First Principles Calculations On  $\Sigma$  3(112) Grain Boundary Impurities In Multicrystalline Silicon ..... 672  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-28  
 A. Suvitha, N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

21. Theoretical Investigation of the Hydrogen Storage Capacity of  $C_{60}(OM)_{12}$   
(M=Li and Na) Clusters ..... 673  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-29  
Qi Peng, Gang Chen, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, and  
Yoshiyuki Kawazoe
22. *Ab-Initio* Study on Magnetism and Hyperfine Coupling in  $M$  Doped  $Si_{16}H_{16}$   
Fullerene Cages:  $M = Cr, Mn, \text{ and } Fe$  ..... 674  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-31  
Mohammad Saeed Bahramy, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
23. *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation of  $Fe_{76}Si_9B_{10}P_5$  Amorphous Alloy in  
Quenching Process ..... 675  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-32  
M. Ogata, Rodion V. Belosludov, A. Takeuchi, A. Makino, A. Inoue and  
Y. Kawazoe
24. Theoretical Study on Metal Organic Frameworks by All-Electron Mixed-Basis  
Program TOMBO ..... 676  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-33  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and  
Yoshiyuki Kawazoe

25. A First Principles Study of Electronic and Elastic Properties in Boron Rich Compounds ..... 677  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-34  
 Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
26. Controlling the Percolation Behavior of Conductor-Insulator Composites by Changing the Granular Size of Insulators (II) ..... 678  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-35  
 Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Magneto-Optoelectronic Properties of Mn-Doped Indium Tin Oxide ..... 679  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-36  
 Madhvendra Nath Tripathi, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
28. Structures of Neutral and Anionic Au<sub>16</sub> Clusters Revisited ..... 680  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-37  
 Gang Chen, Qian Wang, Qiang Sun, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
29. Theoretical Study of the Terahertz Absorption Spectra of Polymorphism in Crystalline Amino Acids ..... 681  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-38  
 Eunsang Kwon, Yusuke Izutani and Yoshiyuki Kawazoe

30. Theoretical Study of Hydrogen Clathrate Hydrate: Hydrogen Storage ..... 682  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-39  
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov and  
Y. Kawazoe
31. Quantum Chemical Calculations on Non-bonded Interactions between Rubber and  
Carbon Black ..... 683  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-41  
Kenmei Hamada, Yasumasa Bito, Yasuhisa Minagawa, Ryunosuke Note,  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
32. Chemical Engineering of Prehydrogenated C and BN sheets by Li: Application in  
Hydrogen Storage ..... 684  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-44  
M. Khazaei, M. S. Bahramy, N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and  
Y. Kawazoe
33. Hydrogen Adsorption on Ni-Interstitial Metal Hydrides: A Cluster Approach ..... 685  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science – Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-46  
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe

34. Theoretical Prediction of Thermoelectric Properties in Double-filled Type-I Sn Clathrates ..... 686  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-52  
 K. Akai, Y. Kohno, K. Kishimoto and T. Koyanagi
35. Thermoelectric Properties and Electronic Structure of the Type-I Clathrate  $K_8Sn_{44}$  ..... 687  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-53  
 Masahiro Hayashi, Kengo Kishimoto, Koji Akai, Hironori Asada and Tsuyoshi Koyanagi
36. Stability of Charged Rh Cubical Clusters ..... 688  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-56  
 Y. C. Bae, V. Kumar and Y. Kawazoe
37. Electron Conductivity of the Molecular Devices: A New Application for TOMBO ..... 689  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-59  
 Y. Y. Liang, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
38. First-Principles Study on Crystal Structure of Cement Clinker Compound ..... 690  
 The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)  
 Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14) No.PS-60  
 Ryoji Sakurada, Abhishek Kumar Singh, Masami Uzawa and Yoshiyuki Kawazoe

39. Size-Evolution of Structures and Reactivity of Copper Cluster Cations ..... 691  
 4th Jekyll Island Conference on Clusters and Nanostructures  
 Georgia, USA (2010.2.16-19)  
 M. Ichihashi, S. Hirabayashi and T. Kondow
40. Paradigm Shift in Computational Materials Science –From Explanation to  
 Prediction; True *ab initio* Calculations Chage Materials Research Community– ..... 692  
 ICONN 2010 –International Conference on Nanoscience and Nanotechnology  
 Sydney, Australia (2010.2.22-26) Plenary Session 3 (Plenary)  
 Yoshiyuki Kawazoe
41. Width-Dependence of Magnetic Properties of Edge-Doped Graphene Nanoribbons  
 by Fe ..... 694  
 ICONN 2010 –International Conference on Nanoscience and Nanotechnology  
 Sydney, Australia (2010.2.22-26) Symposium 4 (Oral)  
 Narjes Gorjizadeh, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
42. Metal-Organic Framework Materials for Gas and Drug Separation: Theoretical Study ..... 696  
 ICONN 2010 –International Conference on Nanoscience and Nanotechnology  
 Sydney, Australia (2010.2.22-26) Symposium 6 (Oral)  
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
43. Accurate Description of Thermodynamic Properties of Hydrogen Clathrate Hydrates ..... 698  
 ICONN 2010 –International Conference on Nanoscience and Nanotechnology  
 Sydney, Australia (2010.2.22-26) Poster session 3, 2.25-No.7 (Poster)  
 Rodion Belosludov, Oleg Subbotin, Hiroshi Mizuseki Vladimir Belosludov  
 and Yoshiyuki Kawazoe
44. Theoretical Study of Hydrogen Storage Materials by All-Electron Mixed-Basis  
 Program TOMBO ..... 700  
 The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials  
 Tokyo, Japan (2010.3.2) p.199, No.P19  
 R. Sahara, H. Mizuseki, Marcel Sluiter, K. Ohno and Y. Kawazoe



45. Theoretical Study on Alkali Atom Doping to Enhance the Storage Capacity of  
Materials ..... 701  
The 5th Japan-China Seminar on Hydrogen Storage Materials  
Tokyo, Japan (2010.3.2) p.200, No.P20  
Hiroshi Mizuseki, Natarajan S. Venkataramanan, Gang Chen, Ryoji Sahara  
and Yoshiyuki Kawazoe
46. *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation of  $\text{Fe}_{76}\text{Si}_9\text{B}_{10}\text{P}_5$  Amorphous Alloy in  
Quenching Process ..... 702  
The 2010 WPI-AIMR Annual Workshop  
Sendai, Japan (2010.3.25-27) p.99, No.P-47  
Makoto Ogata, Rodion V. Belosludov, Akira Takeuchi, Akihiro Makino and  
Akihisa Inoue

## IV. 紀要

### < 2009 年 >

1. ガス吸蔵材料における安定性評価に関する研究 ..... 703  
平成 20 年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2009.6) pp.53-54  
池庄司民夫, 小川 浩, 手塚明則, 片桐昌彦, 川添良幸, 水関博志,  
佐原亮二, Rodion V. Belosludov
2. 第一原理分子動力学法によるビーライト (C<sub>2</sub>S) の結晶構造解析 ..... 705  
平成 20 年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2009.6) pp.87-88  
桜田良治, Abhishek Kumar Singh, 鷗沢正美, 川添良幸
3. 全電子混合基底法第一原理計算による基板上のナノ物質構造の研究 ..... 707  
平成 20 年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2009.6) p.98  
村上純一, 三木一司, 大野かおる, 石井 聡, 飯高敏晃, 重田育照,  
川添良幸
4. ナノケージ物質の構造と物性に関する研究 ..... 708  
平成 20 年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2009.6) p.99  
奥 健夫, 小井成弘, 菅沼克昭, 川添良幸, Rodion V. Belosludov,  
平賀賢二
5. 新規ナノ物質開発の基盤としての金属クラスターの物性・反応性解明 ..... 709  
平成 20 年度 東北大学金属材料研究所  
研究部共同研究報告 (2009.6) pp.100-101  
近藤 保, 寺寄 亨, 市橋正彦, 安松久登, 川添良幸, 水関博志,  
高橋まさえ

6. NPO 法人による活動という新しい産学官連携の形もー第3章 日本と世界をリードする研究大学～ Part.4 社会との接点では～産学官連携による時代の課題への答えー ..... 711  
2010 年度入学者用 東北大学案内 (2009.7) p.27
7. 全電子混合基底法第一原理計算プログラムの開発とナノ構造体への適用 ..... 712  
文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」  
プロジェクトー次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究  
開発ー平成 21 年度 研究成果報告書 pp.42-43  
川添良幸

< 2010 年 >

1. 熱硬化性樹脂原料の構造・物性シミュレーションー戦略分野利用推進 B  
( ナノマテリアルシミュレータによる新材料開発 ) ..... 714  
平成 19・20 年度 文部科学省 先端研究施設共用イノベーション創出事業【産業戦略利用】  
先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス、  
平成 21 年度 文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金 ( 先端研究施設共用促進事業 )  
先端的大規模計算利用サービス  
利用成果報告書  
東京大学情報基盤センター (2010.3) pp.12-15

## V. 予稿集

### < 2009 年 >

1. 非対称ナノグラフェンの室温強磁性 ..... 719  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.63, No.S2-5 (Oral)  
大田憲雄, Narjes Gorjizadeh, 川添良幸
2. メゾスコピックホールにより制御されたポルフィリン分子の光物性 ..... 720  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.79, No.S4-5 (Oral)  
船場康司, 渡辺英一郎, 根城 均, N. S. Venkataramanan
3. Theoretical Insights into the Formation, Structure, and Energetics of Anticancer  
Oxaliplatin Drug and Cucurbit[*n*]urils  $n = 5$  to  $8$  ..... 721  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.100, No.P1-02 (Poster)  
Suvitha, A., Venkataramanan N. S., Belosludov, R. V., Mizuseki, H.,  
Kawazoe, Y., and N. Ohuchi
4. Electronic and Magnetic Properties of Fe Chains on Graphene Nanoribbons ..... 722  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.127, No.P1-29 (Poster)  
Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
5. Dynamics of  $H^+$  Transport in Hydrated Proton Exchange Membrane for PEMFC by  
Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics UA-QCMD Method ..... 723  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.144, No.P1-46 (Poster)  
Maaouia Souissi

6. Electronic Structure of Defected Graphane Structures ..... 724  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.145, No.P1-47 (Poster)  
Mohammad Khazaei, Mohammad S. Bahramy, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
7. Hydrogen Storage on Organic Hosts ..... 725  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.146, No.P1-48 (Poster)  
Venkataramanan, N. S., Sahara, R., Mizuseki, H., and Kawazoe, Y.
8. Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium ..... 726  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.147, No.P1-49 (Poster)  
G. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
9. シリコン結晶粒界のシミュレーション研究 ..... 727  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.154, No.P1-56 (Poster)  
水関博志, 佐原亮二, A. Suvitha, 川添良幸
10. Theoretical Study of Quantum Dot/Organic Ligand Interface ..... 728  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.155, No.P1-57 (Poster)  
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe
11. Theoretical Study of Hydrogen Hydrate as Hydrogen Storage Material: Role of  
Second Guest Component ..... 729  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.156, No.P1-58 (Poster)  
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov and  
Y. Kawazoe

12. 第一原理ポテンシャルを基にした DNA のフォノン計算 ..... 730  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.159, No.P2-01 (Poster)  
 斎藤繁喜, 水関博志, 片桐昌彦, 川添良幸
13. An Efficient Tool to Analyze Fluid Flow in Nanopores ..... 731  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.169, No.P2-11 (Poster)  
 S. Ahadian and Y. Kawazoe
14. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine interactions of Hydrogen Monomer,  
 Dimers, Trimers and Tetramers on Graphene ..... 732  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.182, No.P2-24 (Poster)  
 Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei,  
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
15.  $\text{Na}_N$  クラスタの  $N$  依存安定性 ..... 733  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.196, No.P2-38 (Poster)  
 伊藤正寛, Vijay Kumar, 阿尻雅文, 川添良幸
16. 新しい炭素結晶 ..... 734  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.197, No.P2-39 (Poster)  
 伊藤正寛, 小谷元子, 内藤久資, 砂田利一, 川添良幸, 阿尻雅文
17. *Ab Initio* Study on Magnetism and Hyperfine Structure in  $\text{Si}_{16}\text{H}_{16}$  Fullerenes  
 Endohedrally Doped by  $M = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{and Fe}$  ..... 735  
 ナノ学会第 7 回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.198, No.P2-40 (Poster)  
 Mohammad Saeed Bahramy, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

18. *Ab-Initio* Study of the Electronic and Optical Properties of the Oxidized Indium Tin Oxide ..... 736  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.212, No.P2-54 (Poster)  
 M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
19. 対分布関数による He 原子励起状態の Hund スピン多重度則の研究 ..... 737  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.214, No.P2-56 (Poster)  
 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋
20. The Small Pt Catalyst Particle Supported on Carbon Nanotube ..... 738  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.215, No.P2-57 (Poster)  
 G. Chen and Y. Kawazoe
21. *Ab Initio* Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage Materials ..... 739  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.216, No.P2-58 (Poster)  
 N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
22. 熔融金属フラックス法で得られた層状新化合物  $\text{PrRh}_{4.8}\text{B}_2$  の結晶構造と性質 ..... 740  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.224, No.P3-04 (Poster)  
 宍戸統悦, 森 孝雄, 湯蓋邦夫, 岡田 繁, 工藤邦男, 澤田 豊,  
 佐原亮二, ビジャイ クマール, 野村明子, 菅原孝昌, 古曳重美,  
 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄
23. 近似的に等確率な新しいランダムウォーク発生アルゴリズム ..... 741  
 ナノ学会第7回大会  
 東京大学 (2009.5.9-11) p.228, No.P3-08 (Poster)  
 志田和人, 川添良幸

24. The Kinetics of Li Atom in  $\text{LiBH}_4$  ..... 742  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.247, No.P3-27 (Poster)  
Qi Peng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の結合エネルギー計算 ..... 743  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.250, No.P3-30 (Poster)  
佐原亮二, 亀掛川理, 水関博志, Marcel H. F. Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
26. 直径分布のある場合の繰り込みによるパーコレーション閾値の予測 ..... 744  
ナノ学会第7回大会  
東京大学 (2009.5.9-11) p.255, No.P3-35 (Poster)  
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
27. 第一原理計算による水素貯蔵材料研究 ..... 745  
第117回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) (一般講演, Oral)  
水関博志
28. An Efficient Tool to Analyze Fluid Flow in Nanopores ..... 746  
第117回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.20 (Poster)  
Samad Ahadian and Yoshiyuki Kawazoe
29. Electronic Structure of Defected Graphane Structures ..... 747  
第117回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.49 (Poster)  
Mohammad Khazaei, Mohammad S. Bahrany, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe



30. *Ab Initio* Study of the Alkali-Metal Doped BN Fullerene as Hydrogen Storage  
Material ..... 748  
第 117 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.50 (Poster)  
N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
31. Dynamics of H<sup>+</sup> Transport in Hydrated Proton Exchange Membrane for PEMFC by  
Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics UA-QCMD Method ..... 749  
第 117 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.51 (Poster)  
Maaouia Souissi
32. *Ab-Initio* Study of Manganese-Doped Indium Tin Oxide ..... 750  
第 117 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.52 (Poster)  
M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
33. 粒子直径に分布があるサイトパーコレーションの繰り込み論 ..... 751  
第 117 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年春季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.5.14-15) p.71 (Poster)  
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
34. Reactions of Size-Selected Copper Cluster Cations with Oxygen Molecule:  
Relation with the Electronic Shell Structure ..... 752  
第 25 回化学反応討論会  
さいたま市 (2009.6.1-3) No.1P12  
Shinichi Hirabayashi, Masahiko Ichihashi, Tamotsu Kondow
35. 三次元有限要素解析による Si バルク多結晶の粒界の方位関係とせん断応力  
との関係 ..... 753  
第 6 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム  
新潟 (2009.7.2-3) session4 (Oral)  
高橋 勲, 宇佐美徳隆, 沓掛健太郎, 森下浩平, 中嶋一雄

36. 理論物理は実験の説明から新物質予言へとパラダイムシフト ..... 756  
JASVA Day 東北 ～太陽電池発電の将来展望～  
仙台 (2009.7.7) (招待講演)  
川添良幸
37. 材料物性説明から新物質予言へのパラダイムシフト方策 ..... 765  
講演会「次世代スパコンに向けた計算材料科学の課題と展望」  
東京大学 (2009.7.21) (Oral)  
川添良幸
38. 計算機シミュレーションによる新材料設計 ..... 767  
東北大学金属材料研究所 第 79 回夏期講習会テキスト  
東北大学金属材料研究所 (2009.7.22-24) pp.61-89  
川添良幸
39. Effect of High Tin Concentration on the Electronic Structure of Indium Tin Oxide ..... 781  
日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回) 大会  
京都大学 (2009.9.15-17) p.278, No.267 (Oral)  
M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe
40. Theoretical Investigation of Artificially Controlled Grain Boundaries in  
Multicrystalline Silicon ..... 781  
日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回) 大会  
京都大学 (2009.9.15-17) p.278, No.268 (Oral)  
Hiroshi Mizuseki, Ambigapathy Suvitha, Ryoji Sahara  
and Yoshiyuki Kawazoe
41. 多元系 Fe 基金属ガラスの非晶質相安定性に関する分子動力学計算 ..... 782  
日本金属学会 2009 年秋期 (第 145 回) 大会  
京都大学 (2009.9.15-17) p.342, No.458 (Oral)  
緒方 真, 竹内 章, Rodion V. Belosludov, 牧野彰宏, 井上明久

42. First Principles Calculations on Hydrogen Storage Properties of MOFs, Organic Hosts, and BN Fullerenes ..... 782  
 日本金属学会 2009 年秋期 ( 第 145 回 ) 大会  
 京都大学 (2009.9.15-17) p.378, No.567 (Oral)  
 N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, R. Sahara and Y. Kawazoe
43. 計算科学による CO<sub>2</sub> 個体化学吸収のシミュレーション ..... 783  
 第 158 回 社団法人 日本鉄鋼協会 秋季講演大会  
 京都大学 (2009.9.15-17) No.PS-11 (Poster)  
 和久田康司, 植田 滋, 井上 亮, 有山達郎, R. Belosludov, 川添良幸
44. 熔融 Cu をフラックスとして得られた層状新化合物 PrRh<sub>4.8</sub>B<sub>2</sub> の結晶構造と性質 ... 784  
 社団法人 日本セラミックス協会 第 22 回 秋季シンポジウム  
 愛媛大学 (2009.9.16-18) p.270, No.1PK08 (Poster)  
 穴戸統悦, 森 孝雄, 湯蓋邦夫, 岡田 繁, 工藤邦男, 澤田 豊,  
 佐原亮二, 林 好一, ビジャイ クマール, 野村明子, 菅原孝昌,  
 古曳重美, 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄
45. スラブ模型に基づくカルボン酸修飾セリアナノ粒子に関する第一原理計算 ..... 785  
 化学工学会 第 41 回秋季大会  
 — SCEJ 41st Autumn Meeting (Higashi-Hiroshima, 2009) —  
 広島大学 (2009.9.16-18) P.392, No.F121  
 伊藤正寛, 名嘉 節, 張 静, 金子賢治, 大原 智, 佐藤康一,  
 高見誠一, 川添良幸, 阿尻雅文
46. 酸化物 CZ 炉総合熱解析— 2D 及び 3D モデルの統合法の検討 ..... 786  
 化学工学会 第 41 回秋季大会  
 — SCEJ 41st Autumn Meeting (Higashi-Hiroshima, 2009) —  
 広島大学 (2009.9.16-18) p.664, No.P301 (Oral)  
 塚田隆夫, 杉岡健一, 小林正樹, 敬 成君

47. ペロブスカイト型  $\text{CeAlO}_3$  の合成に関する研究 ..... 787  
平成 21 年度 化学系学協会東北大会  
福島県郡山市 日本大学工学部 (2009.9.19-21) p.117, No.2P006 (Poster)  
穴戸統悦, 田中雅彦, 戸澤慎一郎, 野村明子, 岡田 繁, 工藤邦男,  
澤田 豊, 手嶋勝弥, 天野忠昭, 大石修治, 川添良幸
48. ペロブスカイト型  $\text{RRh}_3\text{B}$  ( $\text{R} = \text{希土類元素}$ ) の硬さに関する研究 ..... 787  
平成 21 年度 化学系学協会東北大会  
福島県郡山市 日本大学工学部 (2009.9.19-21) p.118, No.2P007 (Poster)  
穴戸統悦, 野村明子, 湯蓋邦夫, 佐原亮二, ビジャイ クマール,  
工藤邦男, 岡田 繁, 森 孝雄, 澤田 豊, 田中雅彦, 菅原孝昌,  
小原和夫, 手嶋勝弥, 古曳重美, 天野忠昭, 大石修治, 川添良幸,  
中嶋一雄
49. 酸素分子による銅クラスターイオンの酸化反応：反応のサイズ偶奇性の発現  
と消失 ..... 788  
第 3 回分子科学討論会  
名古屋大学 (2009.9.21-24) No.4D16  
平林慎一, 市橋正彦, 近藤 保
50. 金属蛋白質の触媒反応の理論解析 ..... 790  
第 47 回日本生物物理学会年会  
徳島文理大学 (2009.10.30-11.1) No.2SP6-04 (Invited)  
重田育照, 神谷克政
51. Coated Conductor の事前曲げ効果の有限要素法による 3 次元歪解析 ..... 791  
第 81 回 2009 年度秋季低温工学・超電導学会  
岡山大学 (2009.11.18-20) p.79, No.1P-p07 (Poster)  
中島康希, 村瀬 暁, 七戸 希, 淡路 智, 渡辺和雄
52. 製法の異なる  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  超電導線の事前曲げ効果の 3 次元歪解析による検討 ..... 792  
第 81 回 2009 年度秋季低温工学・超電導学会  
岡山大学 (2009.11.18-20) p.161, No.2P-p09 (Poster)  
延原正彦, 村瀬 暁, 七戸 希, 淡路 智, 西島 元, 渡辺和雄

53. Assessment of the Kinetics of the Capillary Imbibition of a Simple Fluid at Nanoscale with the Aid of the Molecular Dynamics Simulation Approach ..... 793  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.1 (poster)  
Samad Ahadian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
54. 粉末安息香酸二量体の温度依存テラヘルツ帯振動スペクトルの解釈 ..... 794  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.25 (poster)  
高橋まさえ, 川添良幸, 石川陽一, 伊藤弘昌
55. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の結合エネルギー計算 ..... 795  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.59 (poster)  
佐原亮二, 水関博志, Marcel H. F. Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
56. Stochastic Switching behavior of Molecular Current: A First-Principles Study ..... 796  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.60 (poster)  
Y. Y. Liang, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
57. Theoretical Investigation of Hydrogen Storage Ability of a Carbon Nanohorn ..... 797  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.63 (poster)  
G. Chen, Q. Peng, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
58. The Kinetics of Lithium Atoms in  $\text{LiBH}_4$  ..... 798  
第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.64 (poster)  
Qi Peng and Yoshiyuki Kawazoe

59. The Opto-Electronic Properties of Highly Doped Indium Tin Oxide ..... 799  
 第 118 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2009 年秋季)  
 東北大学金属材料研究所 (2009.11.26-27) p.97 (poster)  
 M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
60. Electronic and Magnetic Properties of Fe Chains on Graphene Nanoribbons. .... 800  
 KINKEN-WAKATE2009 – 6th Materials Science School for Young Scientists  
 “Bio- and Nano- materials for Next Generation” –  
 AKiu-spa, Sendai, Japan (2009.12.3-4) p.21, No.A-1 (Poster)  
 N. Gorjizadeh and Y. Kawazoe
61. Theoretical Investigation of the Hydrogen Storage Capacity of  $C_{60}(OM)_{12}$   
 (M=Li and Na) Clusters ..... 801  
 KINKEN-WAKATE2009 – 6th Materials Science School for Young Scientists  
 “Bio- and Nano- materials for Next Generation” –  
 AKiu-spa, Sendai, Japan (2009.12.3-4) p.53, No.A-33 (Poster)  
 Qi Peng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
62. 第一原理計算による多ホウ化物の弾性特性解析 ..... 802  
 第 4 回日本フラックス成長研究発表会  
 愛知県常滑市 (2009.12.11-12) No.1014 (Oral)  
 (J. Flux. Growth, 4[2] (2009) p.75)  
 佐原亮二, 宍戸統悦, 野村明子, 工藤邦男, 岡田 繁, Vijay Kumar,  
 中嶋一雄, 川添良幸
63. アーク溶融反応法によるペロブスカイト型  $RRh_3B$  (R = La ~ Lu, Y, Sc) の合成 ..... 803  
 第 4 回日本フラックス成長研究発表会  
 愛知県常滑市 (2009.12.11-12) No.1TO01 (技術講演)  
 (J. Flux. Growth, 4[2] (2009) p.76)  
 野村明子, 小原和夫, 岡田 繁, 工藤邦男, 澤田 豊, 森 孝雄,  
 田中雅彦, 湯蓋邦夫, 佐原亮二, ビジャイ クマール, 林 好一,  
 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸, 宍戸統悦

< 2010 年 >

1. 物質材料研究におけるスーパーコンピューティングシステムの現状と将来 ..... 804  
独立行政法人 日本学術振興会  
ー材料の微細組織と機能性第 133 委員会ー第 204 回研究会資料  
東京理科大学 (2010.1.22) pp.9-14  
川添良幸
  
2. シミュレーションによるシリコン結晶粒界研究 ..... 810  
神戸大学自然科学系先端融合研究環 ナノエンジニアリング  
重点研究チームーナノ学会「ナノ構造・物性」部会  
「ナノ構造・物性」第 2 回研究会  
神戸大学 (2010.1.22-23) No.G-9  
水関博志, A. Suvitha, 佐原亮二, 川添良幸
  
3. 全電子混合基底法プログラム TOMBO を用いた水素貯蔵材料の結合エネルギー計算 ..... 811  
神戸大学自然科学系先端融合研究環 ナノエンジニアリング  
重点研究チームーナノ学会「ナノ構造・物性」部会  
「ナノ構造・物性」第 2 回研究会  
神戸大学 (2010.1.22-23) No.G-10  
佐原亮二, 水関博志, M. H. F. Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
  
4.  $\text{KNbO}_3$  の高精度な全エネルギー表面の第一原理計算と分子動力学シミュレーション ..... 812  
文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
第 4 回公開シンポジウム  
愛知県岡崎市 (2010.3.3-4) No.P02 (Poster)  
西松 毅, 牛尾二郎, 川添良幸, Umesh Waghmare

5. Quantum Chemical Studies on the Hydrogen Storage of Calixarene ..... 813  
 文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 第4回公開シンポジウム  
 愛知県岡崎市 (2010.3.3-4) No.P12 (Poster)  
 Venkataramanan, N. S.; Sahara, R.; Mizuseki, H.; Kawazoe, Y.;
6. The Electron Current through the Organic Molecule ..... 814  
 文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 第4回公開シンポジウム  
 愛知県岡崎市 (2010.3.3-4) No.P13 (Poster)  
 Y. Y. Liang, H. Chen, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
7. Magneto-Optoelectronic Properties of Mn-Doped Indium Tin Oxide ..... 815  
 文部科学省「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 第4回公開シンポジウム  
 愛知県岡崎市 (2010.3.3-4) No.P14 (Poster)  
 M. N. Tripathi, M. S. Bahramy, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
8. Electronic and Magnetic Properties of Doped Graphene Nanoribbons ..... 816  
 グローバル COE プログラム 東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会  
 東北大学金属材料研究所 (2010.3.9) p.15, No.O-15 (Oral)  
 Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
9. First-Principles Calculations on Hydrogen Storage Properties of CS-4 Clathrate Hydrate ..... 817  
 グローバル COE プログラム 東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会  
 東北大学金属材料研究所 (2010.3.9) p.55, No.P-039 (Poster)  
 Maaouia Souissi, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe



10. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer, Dimers, Trimers, Tetramers and Hexamers on Graphene ..... 818  
 グローバル COE プログラム 東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会  
 東北大学金属材料研究所 (2010.3.9) p.56, No.P-040 (Poster)  
 Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
11. Theoretical Investigation of the Hydrogen Storage Capacity of  $C_{60}(OM)_{12}$  (M=Li and Na) Clusters ..... 819  
 グローバル COE プログラム 東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会  
 東北大学金属材料研究所 (2010.3.9) p.57, No.P-041 (Poster)  
 Qi Peng, Gang Chen, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
12. First Principle Calculation of Langatate Piezoelectric Material with Cation Vacancies ..... 820  
 グローバル COE プログラム 東北大学「材料インテグレーション国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会  
 東北大学金属材料研究所 (2010.3.9) p.58, No.P-042 (Poster)  
 Chan-Yeup Chung, Ritsuko Yaokawa, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
13. 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO とその応用 ..... 821  
 文科省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト—次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 次世代ナノ情報機能・材料分野 公開研究会「新物質とエネルギー」  
 東京国際フォーラム (2010.3.10-11) No.W08 (Oral)  
 川添良幸, 水関博志, 佐原亮二, 大野かおる, Marcel Sluiter

14. 第一原理計算による持続可能なエネルギー材料評価 ..... 822  
 文科省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト  
 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 次世代ナノ情報機能・材料分野 公開研究会「新物質とエネルギー」  
 東京国際フォーラム (2010.3.10-11) No.P-04 (Poster)  
 水関博志, N. S. Venkataramanan, 陳 剛, R. V. Belosludov, A. Suvitha,  
 佐原亮二, 川添良幸
15. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の開発 ..... 823  
 文科省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト  
 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
 次世代ナノ情報機能・材料分野 公開研究会「新物質とエネルギー」  
 東京国際フォーラム (2010.3.10-11) No.P-06 (Poster)  
 佐原亮二, N. S. Venkataramanan, Marcel Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
16. High-Pressure Polytypes of  $MgC_2$  Predicted by First-Principles Calculations ..... 824  
 化学工学会 第 75 年会 – SCEJ 75th Annual Meeting (Kagoshima, 2010) –  
 鹿児島大学 (2010.3.18-20) p.495, No.M108  
 Bin Wen, Seiichi Takami, Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri
17. 銅クラスターへの酸素吸着反応 – サイズによるクラスターの構造転移と  
 反応性変化 ..... 825  
 日本物理学会 第 65 回年次大会  
 岡山大学 (2010.3.20-23) No.20aGL-6  
 市橋正彦, 平林慎一, 川添良幸, 近藤 保
18. Chemical Heterogeneity and Dynamics of a Multicomponent Bulk Metallic Glass  
 with High Glass-Forming Ability ..... 826  
 The 2010 WPI-AIMR Annual Workshop  
 Sendai (2010.3.25-27) p.44, No.3A-4 (Oral)  
 T. Fujita, K. Konno, P. F. Guan, W. Zhang, V. Kumar, M. Matsuura, A. Inoue,  
 H. W. Sheng, T. Sakurai and M. W. Chen

19. Dynamic Flow and Glass Transition in Metallic Glasses ..... 827  
The 2010 WPI-AIMR Annual Workshop  
Sendai (2010.3.25-27) p.79, No.P-27 (Poster)  
Pengfei Guan, Mingwei Chen and Takeshi Egami
20. グラフェンのジグザグ端とアームチェア端における Stone-Wales 転位の  
ピレンを用いたモデル計算：活性化エネルギーとその芳香族性の関係 ..... 828  
日本化学会第 90 春季年会 (2010)  
近畿大学 (2010.3.26-29) No.2H9-36 (Oral)  
山崎 馨, 新津直幸, 河野裕彦
21. Tersoff ポテンシャルおよび第一原理計算によるシリコン結晶粒界評価 ..... 829  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.90, No.S2.23  
水関博志, Ambigapathy Suvitha, 佐原亮二, 川添良幸
22. 第一原理計算によるアルカリ金属をドーブした材料の水素貯蔵性能評価 ..... 829  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.125, No.S4.14  
水関博志, Natarajan S. Venkataramanan, 陳 剛, M. Khazaei, 佐原亮二,  
川添良幸
23. 第一原理 MD による  $\text{Fe}_{76}\text{Si}_9\text{B}_{10}\text{P}_5$  非晶質合金の形成過程におけるダイナミク  
ス解析 ..... 830  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.378, No.520  
緒方 真, 竹内 章, Rodion V. Belosludov, 牧野彰宏, 井上明久,  
川添良幸
24. An Atomistic Level Description of the Quantum Dot Organic Ligand Interface ..... 830  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.408, No.611  
R. V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸

25. 全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料の結合エネルギー計算 ..... 831  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.409, No.614  
佐原亮二, 水関博志, Marcel H. F. Sluiter, 大野かおる, 川添良幸
26. Magneto-Optoelectronic Properties of Mn-Doped Indium Tin Oxide ..... 831  
日本金属学会 2010 春期 (第 146 回) 大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) p.411, No.619  
Madhvendra Nath Tripathi, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
27. 第一原理計算による CO<sub>2</sub> 固体化学吸収材の設計 ..... 832  
第 159 回 社団法人 日本鉄鋼協会 秋季講演大会  
筑波大学 (2010.3.28-30) No.95 (Oral)  
和久田康司, 植田 滋, 井上 亮, 有山達郎, R. Belosludov, 川添良幸

## VI. 新聞記事

### < 2009 年 >

1. 第3の炭素結晶を計算で証明－本学教授らの研究グループ－合成実験に着手 ..... 833  
東北大学新聞 (2009.4.16)
2. ナノ学会 第7回大会を東大で開催－5月9～11日－最先端ナノテク研究が目白押し ..... 834  
半導体産業新聞 (2009.4.22)
3. 太陽電池発電 技術展望探る－仙台でセミナー－ ..... 835  
河北新報 (2009.7.13)
4. グラフェン強磁性化－半水素化で特定安定－東北大スパコン使い確認 ..... 836  
日刊工業新聞 (2009.9.29)

## VII. 雑誌等掲載解説記事

### < 2009 年 >

1. 『「The Third General Meeting of ACCMS-VO」報告』 ..... 837  
IMR ニュース KINKEN, Vol.59 2009 SUMMER (2009.6) p.9  
川添良幸
2. 『材料科学・計算化学“第三の炭素結晶”がさらに現実的に』 ..... 838  
現代化学－CHEMISTRY TODAY－No.459 (2009.6) p.11
3. 『JASVA Day 東北開催される－テーマは太陽電池の将来展望－』 ..... 839  
(社)日本半導体ベンチャー協会 月例会報 No.99  
JASVA 通信 (2009.7) pp.2-3
4. 『特集「計算材料科学・工学の最前線(1)」によせて』 ..... 840  
日本金属学会誌 73[8] (2009) p.549  
川添良幸, 香山正憲

5. 『フロント経験則の解釈ー模型から *ab initio* へ戦略を転換する起点ー』 ..... 841  
物性研究, 物性研究刊行会, 92[5-6] (2009. 8,9 月合併号) pp.483-493  
安原 洋, 小山田隆行, 本郷研太, 丸山洋平

6. 『炭素の新しい金属結晶 K4』 ..... 870  
IMR ニュース KINKEN, Vol.60 2009 AUTUMN (2009.10) p.4  
川添良幸

#### < 2010 年 >

1. 『コンピュータシミュレーションで「常識」の誤りを打ち破る』 ..... 871  
まなびのめ 第7号 (2010.1)  
川添良幸
2. 『Preface』 ..... 872  
The Fourth General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on  
Computational Materials Science - Virtual Organization)  
Sendai, Matsushima, Japan (2010.1.12-14)  
Yoshiyuki Kawazoe, Tamio Ikeshoji, Hiroshi Mizuseki and Ryoji Sahara

#### Web 記事

##### < 2009 年 >

1. 『New Graphene-Based, Nano-Material has Magnetic Properties』 ..... 873  
Science Daily (2009.9.2)
2. 『東北大、グラフェンの強磁性化をスパコン使い確認』 ..... 874  
日刊工業新聞 Business Line (2009.9.29)

#### VIII. 書籍

##### < 2008 年 >

1. 『Field Emission Properties of Carbon Nanotubes from First-Principles Calculations』 ..... 875  
“DFT Calculations on Fullerenes and Carbon Nanotubes”,  
Research Signpost (2008) pp.333-365  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

## < 2009 年 >

1. 『Boron Nitride Nanocage Clusters, Nanotubes, Nanohorns, Nanoparticles, and Nanocapsules』 ..... 892  
“Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, Vol. 6  
— B-C-N Nanotubes and Related Nanostructures”  
Springer (2009.5) chapter 6, pp.149-194  
Takeo Oku, Ichihito Narita, Naruhiro Koi, Atsushi Nishiwaki,  
Katsuaki Suganuma, Masahiro Inoue, Kenji Hiraga, Toshitsugu Matsuda,  
Makoto Hirabayashi, Hisato Tokoro, Shigeo Fujii, Makoto Gonda,  
Masahiko Nishijima, Toshio Hirai, Rodion V. Belosludov and  
Yoshiyuki Kawazoe
2. 『Short Segment Frequency Equalization: A Simple and Effective Alternative Treatment of Background Models in Motif Discovery』 ..... 915  
“Lecture Notes in Computer Science 5780 — Pattern Recognition in Bioinformatics”  
Springer (2009.8) pp.354-364  
Kazuhito Shida
3. 『第一原理分子動力学法』 ..... 921  
“計算力学ハンドブック III 原子 / 分子・分散粒子のシミュレーション”  
日本機械学会 (2009.9) 第 2 章 分子動力学法, 2.1, 分子動力学法の基礎,  
2.1.7, 第一原理分子動力学法, pp.64-69  
川添良幸

## IX. 表彰・授与

1. 『NAREGI ミドルウェアを利用した超大規模材料設計シミュレーション計算環境の最先端学術情報基盤への構築』 ..... 925  
日立 IT ユーザ会 第 46 回大会 (2009.5.21-22)  
小論文「優良賞」  
一関京子, 川添良幸, 五十嵐伸昭, 佐原亮二

## X. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員 ..... 935
2. 計算材料学センター長 新家教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧 ..... 936
3. 計算材料学センター責任部門 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧 ..... 940
4. 東北大学金属材料研究所構内図 ..... 942
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図 ..... 943