

# 2001 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

(2001 年 4 月～2002 年 3 月)

## 目次

### 巻頭言

#### I. 研究内容概要

1. Interactions of Molecular Devices on the Metal Substrate..... 1  
IMR, Tohoku University Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe
2. First-Principles Studies on Structures and Properties of (BN)<sub>x</sub>  
Metallofullerene..... 6  
IMR, Tohoku University Q. Wang, Q. Sun, J. -Z. Yu, T. M. Briere  
and Y. Kawazoe
3. A Statistical Criterion of the Consistency of the Pairwise Comparison  
Matrices..... 7  
IMR, Tohoku University J. Q. Chen, Z. Zeng, H. Mizuseki and Y. Kawazoe  
Department of Engineering Mechanics, Chongqing University Z. L. Wang,
4. Sodium Adsorption on Si (111) 7×7..... 8  
IMR, Tohoku University T. M. Briere, V. Kumar and Y. Kawazoe
5. 次世代紫外領域光透過単結晶の設計..... 10  
東北大学金属材料研究所 寺久保憲昭、西松毅、水関博志、川添良幸、  
島村清史、福田承生  
Institute of Electronic Materials Technology (ITME) Dorota A. PAWLAK
6. 分子デバイス用シクロデキストリン-ポリチオフェン包摂化合物  
分子絶縁被覆導線の構造と電子状態..... 12  
東北大学金属材料研究所 佐藤博之、Rodion V. Belosludov、  
Amir A. Farajain、水関博志、川添良幸

7. 3d 遷移金属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・・・ 14  
東北大学金属材料研究所 八木陽介、Tina M. Briere、Vijay Kumar、  
Marcel Sluiter、川添良幸
8. PNX 分子による分子整流器シミュレーション研究・・・・・・・・・・・・ 15  
東北大学金属材料研究所 新村健二、水関博志、Chiranjib Majumder、  
川添良幸
9. 第一原理計算による  $Al_nH_{3n}$  クラスターの構造と安定性の解析・・・・・・・・ 17  
東北大学金属材料研究所 川村博昭、Vijay Kumar、Qiang Sun、  
川添良幸
10. モンテカルロ直接法によるクラスター気相成長シミュレーション・・・・・・・・ 19  
東北大学金属材料研究所 本郷研太、水関博志、川添良幸
11. Three-dimensional Oscillatory Convection of  $LiCaAlF_6$  Melts in Czochralski  
Crystal Growth・・・・・・・・・・・・ 24  
IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura,  
Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
12. Stability of Nano Systems・・・・・・・・・・・・ 26  
IMR, Tohoku University Q. Sun and Y. Kawazoe
13. First Principles Studies of Metal and Semiconductor Clusters・・・・・・・・ 27  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
14. 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 II・・・・・・・・ 30  
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、Chiranjib Majumder、Rodion V. Belosludov、  
Amir A. Farajian、Jian-Tao Wang、J. Q. Lu、J. Wu、Hao Chen、川添良幸

15. 全電子混合基底法によるシリコン自己格子間原子の  
XPS スペクトルの予想..... 33  
東北大学金属材料研究所 西松毅、水関博志、川添良幸  
セイコーエプソン株式会社研究開発本部 宮田正靖、上原正光  
日立基礎研究所 橋詰富博
16. Elastic Moduli and Mechanical Stability of Clathrate Hydrates of  
Cubic Structure II ..... 34  
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, N. D. Luzhkovskaya  
and Y. Kawazoe  
Institute of Inorganic Chemistry T. M. Inerbaev and V. R. Belosludov
17. Molecular Enamel Wires for Electronic Device..... 36  
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Sato, A. A. Farajian,  
H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe
18. Role of Guest Molecules on the Stability of Different Cagelike Structures of  
Large Water Clusters Investigated by First-principles Calculations..... 38  
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, N. D. Luzhkovskaya,  
H. Mizuseki and Y. Kawazoe  
Institute of Inorganic Chemistry V. R. Belosludov and F. A. Kuznetsov
19. Application of Carbon Nanotube Body to Unique Emitter:  
A First-Principles Study..... 40  
IMR, Tohoku University Gang Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
20. 第一原理計算による SiO<sub>2</sub>/Si 界面構造の研究..... 42  
東北大学金属材料研究所 森里嗣生、川添良幸  
横浜国立大学 大野かおる
21. Structure and Stability of Bi Dimer Linear Chains on Si (001)  
Surfaces..... 44  
IMR, Tohoku University Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe  
Advanced Research Laboratory, Hitachi, Ltd., Tomihiro Hashizume  
Institute of Physics, Chinese Academy of Science En-Ge Wang  
and Ding –Sheng

22. Prediction of Intermixing Tendencies in Garnets: Pyrope and Grossular····· 46  
 IMR, Tohoku University Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe  
 Institut fur Mineralogie, Universitat Munster Victor Vinograd
23. Phase Transformations in Single Wall Carbon Nanotube Bundles under  
 Compression····· 48  
 IMR, Tohoku University Marcel H. F. Sluiter, Vijay Kumar  
 and Yoshiyuki Kawazoe
24. Doped Si Nano-wires····· 50  
 IMR, Tohoku University Abhishek Kr. Singh, Vijay Kumar,  
 Tina M. Briere and Y. Kawazoe
25. 第一原理 GW 近似によるアルカリ金属クラスターの  
 準粒子エネルギー計算····· 51  
 東北大学金属材料研究所 石井聡、川添良幸  
 横浜国立大学 大野かおる
26. Structure and Magnetic Properties of Mn Clusters····· 53  
 IMR, Tohoku University T. M. Briere, M. H. F. Sluiter, V. Kumar  
 and Y. Kawazoe
27. Spin-polarized Transport through Doped Nanotubes Junctions in Presence of  
 Applied Magnetic Field····· 54  
 IMR, Tohoku University A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
28. Tight-binding Study of Mechanically Deformed Carbon  
 Nanotubes····· 55  
 IMR, Tohoku University A. A. Farajian, B. I. Yakobson, H. Mizuseki  
 and Y. Kawazoe
29. 全電子混合基底法プログラムの高精度化とその応用····· 56  
 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

30. 生体高分子の構造と機能:新材料への応用に向けて..... 57  
弘前大学理工学部 種田晃人、清水俊夫  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
31. *Ab Initio* Modeling of Real Molecular Logic Devices..... 58  
Center for Advanced Study, Tsinghua University J. Q. Lu and J. Wu  
Physics Department, Fudan University H. Chen  
IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
32. Ni<sub>6</sub> 及び Ni<sub>4</sub> クラスタとメタノール反応過程の第一原理計算..... 59  
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
33. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる Cu-Au 合金の  
熱力学的特性..... 60  
東北大学工学部 佐原亮二、久保紘  
東北大学金属材料研究所 水関博志、川添良幸  
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる
34. 全電子混合基底法による遷移金属クラスタの構造最適化計算..... 62  
(株)コーデック 斐栄造、長内弘喜  
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 Marcel Sluiter、川添良幸
35. Computer Simulation of Double-tethered Polymers..... 64  
Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University Kazuhito Shida  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
36. Spin-polarized Transport Properties in Diluted Magnetic Semiconductor  
Heterostructures..... 66  
Department of Physics, Tsinghua University Yong Guo, Bing-Lin Gu,  
Jin-Qiang Lu, Hao Wang, Bin Wang and Xin-Yi Chen  
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

37. セメントの水和生成物の形成過程に関する数値シミュレーション..... 69  
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 余京智、川添良幸
38. Precipitating of Copper in Dilute Fe-Cu Alloys..... 70  
IMR, Tohoku University Z. Tang, Y. Nagai and M. Hasegawa
39. 遷移金属酸化物における軌道秩序、揺らぎのその観測..... 72  
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 石原純夫
40. モット絶縁体の共鳴2マグノンラマン散乱..... 73  
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
41. 二次元モット絶縁体の光励起状態と非線形光学応答..... 74  
東北大学金属材料研究所 高橋亮、遠山貴己、前川禎通
42. 銅酸化物におけるフォノン励起スペクトルの電子間相互作用の効果..... 75  
東北大学金属材料研究所 筒井健二
43. 一次元モット絶縁体の非線形光学応答の研究..... 76  
東北大学金属材料研究所 遠山貴己、前川禎通
44. 厳密対角化法による  $t$ - $J$  模型の励起スペクトルの研究..... 77  
東北大学金属材料研究所 遠山貴己、前川禎通
45. ペロフスカイト型 Mn 酸化物における共鳴非弾性 X 線散乱の理論..... 78  
東北大学金属材料研究所 近藤浩、筒井健二、前川禎通  
東北大学理学部物性理論 石原純夫
46. 強相関電子系の熱起電力: スピンと軌道の役割..... 79  
東北大学金属材料研究所 小椎八重航、前川禎通
47. 超伝導体へのスピン注入の理論的研究..... 81  
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

48. 多層系高温超伝導体の電子状態と超伝導振幅…………… 83  
東北大学金属材料研究所 森道康、遠山貴己、前川禎通
49. 超伝導体におけるスピン・ホール効果…………… 85  
東北大学金属材料研究所 高橋三郎、前川禎通
50. エッジ共有型銅酸化物の共鳴非弾性 X 線散乱…………… 86  
東北大学金属材料研究所 吉岡一宏
51. Ni-Bi 系の1対1近傍の状態図…………… 87  
東北大学金属材料研究所 吉田肇、嶋敏之
52. CZ 法による酸化物単結晶育成時の熱流動解析…………… 88  
東北大学金属材料研究所 島村清史、福田承生  
東北大学多元物質科学研究所 小林正樹、塚田隆夫、宝沢光紀
53. 一方向凝固過程における多結晶化メカニズム…………… 90  
東北大学金属材料研究所 宇治原徹、佐崎元、藤原航三、  
宇佐美德隆、中嶋一雄
54. 冷凍機冷却下における酸化物超電導線の熱的安定性…………… 92  
強磁場超伝導材料研究センター 西島元、淡路智、渡辺和雄  
岡山大学工学部 村瀬暁

## II. 原著論文

<2001 年>

1. Formation of New Materials in Fullerene by Using Nuclear Recoil:  
Antimony Case..... 93  
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1575-1578  
Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichirou Shiga, Yoshiyuki Kawazoe,  
Yutaka Maruyama, Koji Shikano and Kazuyoshi Masumoto
2. Excitons and Band Structure of Highly Anisotropic GaTe Single Crystals.. 97  
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.352101-352109  
Aishi Yamamoto, Atsushi Syouji, Takenari Goto, Erkin Kulatov,  
Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Kazuhito Uchida and Noboru Miura
3. Abnormal Intermolecular Interaction between Overlayer C<sub>60</sub> Molecules Due to  
Induced Dipole Moments in C<sub>60</sub> Thin Films Adsorbed on Substrates..... 106  
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1579-1582  
Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
4. Theoretical Study of Hydrogen-related Complexes in Diamond for  
Low-resistive N-type Diamond Semiconductor..... 110  
Physica B, 302-303 (2001) pp.149-154  
Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Katayama-Yoshida and Nozomi Orita
5. Metallic Coverings of Calcium on C<sub>60</sub>..... 116  
Chem. Phys. Lett., 334 (2001) pp.238-244  
Xin-Gao Gong and Vijay Kumar
6. Lattice Monte Carlo Simulation with a Renormalized Potential in Si..... 123  
J. Cryst. Growth, 229 (2001) pp.610-614  
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Hiroshi Kubo and  
Yoshiyuki Kawazoe
7. Metal-encapsulated Fullerenelike and Cubic Caged Clusters of Silicon..... 128  
Phys. Rev. Lett., 87[4] (2001) pp.455031-455034  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe



8. Spin-resonant Splitting in Magnetically Modulated Semimagnetic Semiconductor Superlattices..... 132  
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.1553121-1553129  
Yong Guo, Jun-Qiang Lu, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Three-dimensional Oscillatory Thermocapillary Convection in Liquid Bridge under Microgravity..... 141  
International Journal of Heat and Mass Trans., 44 (2001) pp.3765-3774  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda, Kazuyuki Higashino and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Marangoni Convection in Model of Floating Zone under Microgravity..... 151  
J. Cryst. Growth, 229 (2001) pp.601-604  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Kazuyuki Higashino, Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. Electron Standing-wave Observation in the Pd Overlayer on Au (111) and Cu (111) Surfaces by Scanning Tunneling Microscopy..... 155  
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.814031-814034  
Takayuki Suzuki, Yasuhiro Hasegawa, Zhi-Qiang Li, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Toshio Sakurai
  
12. Capacitance of Magic Ba<sub>n</sub> Clusters..... 159  
Scr. Mater., 44 (2001) pp.1959-1962  
Qian Wang, Qiang Sun, Jing-Zhi Yu, Masaki Sakurai and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Realization of an Effective Ultrahigh Magnetic Field on a Nanoscale..... 163  
J. Phys.: Condens. Matter, 13 (2001) pp.L49-L55  
Siu-Tat Chui, Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Magnetic Phase Competing in MnAu Systems..... 170  
Appl. Phys. Lett., 79[10] (2001) pp.1507-1509  
Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

15. Ordering Effects in the Re-W and Re-Ta Sigma Phases..... 173  
J. Phys.: Condens. Matter, 13 (2001) pp.9433-9443  
Cecile Berne, Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Yoshiyuki Kawazoe  
and Alain Pasturel
16. Site Occupancy in the Re-W Sigma Phase..... 184  
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.1441031-1441038  
Cecile Berne, Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Yoshiyuki Kawazoe,  
Thomas Hansen and Alain Pasturel
17. Formation of Sb- and Te-doped Fullerenes by Using Nuclear Recoil and  
Molecular-dynamics Simulations..... 192  
Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.1254021-1254025  
Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Yoshiyuki Kawazoe,  
Yutaka Maruyama, Koji Shikano and Kazuyoshi Masumoto
18. Magnetic Phase Transition and Hydrogen Solubility in Fe, Co, and Ni..... 197  
J. Phase. Equilib., 22[4] (2001) pp.504-507  
Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Qian Wang and Yoshiyuki Kawazoe
19. Stable Disordered Structures of Vanadium Clusters..... 201  
J. Phys.: Condens. Matter, 13 (2001) pp.L305-L312  
Akito Taneda, Toshio Shimizu and Yoshiyuki Kawazoe
20. All-electron Mixed-basis Calculation to Optimize Structures  
of Vanadium Clusters..... 209  
Mater. Trans., 42[3] (2001) pp.432-434  
Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Kaoru Ohno,  
Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
21. Ring Closure in Dioxin Formation Process: an *Ab Initio* Molecular  
Dynamics Study..... 212  
J. Chem. Phys., 115[14] (2001) pp.6401-6405  
Amir Abbas Farajian, Masuhiro Mikami, Pablo Ordejon and Kazutoshi Tanabe

22. Structure and Interaction Mechanism in the Magic  $\text{Al}_{13}^+\text{H}_2\text{O}$  Cluster  
 Phys. Rev. A, 64 (2001)  
 pp.532031-532036..... 217  
 Qiang Sun, Qian Wang, Jing Zhi Yu, Tina Marie Briere and  
 Yoshiyuki Kawazoe
23. Transport Properties of a Nanotube-based Transistor..... 223  
 Eur. Phys. J. D, 16 (2001) pp.353-355  
 Keivan Esfarjani, Amir Abbas Farajian, Ebrahimi Fredand and  
 Yoshiyuki Kawazoe
24. Exchange Interaction and Magnetic Phase Transition in Layered Fe/Au  
 Superlattices..... 226  
 J. Magn. Magn. Mater., 226-230 (2001) pp.633-634  
 Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
25. Codoping Method for the Fabrication of Low-resistivity Wide Band-gap  
 Semiconductors in P-type GaN, P-type AlN and N-type Diamond: Prediction  
 Versus Experiment..... 228  
 J. Phys.:Condens. Matter, 13 (2001) pp.8901-8914  
 Hiroshi Katayama-Yoshida, Takeshi Nishimatsu, Tetsuya Yamamoto  
 and Nozomi Orita
26. Bipyridinium Molecular Switch: *Ab Initio* Electronic Structure  
 Calculation..... 242  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2276-2278  
 Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Bondlengths and Phase Stability of Silicon-Germanium Alloys  
 under Pressure..... 245  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2201-2205  
 Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
28. *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation of  $\text{Ni}_6$ ..... 250  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1113-1116  
 Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

29. Phase Separation in Fermion Droplets..... 254  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1101-1104  
 Keivan Esfarjani, Siu-Tat Chui, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
30. All-electron Mixed-basis Calculation to Optimize Structures  
 and Electronic Properties of Vanadium Micro Clusters..... 258  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1133-1134  
 Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Kaoru Ohno,  
 Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
31. Absolute Value of Quasiparticle Energies of Li Clusters by an  
*Ab-Initio GW* Approximation..... 260  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1129-1131  
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
32. Theoretical Study on Fe-based Metal Clusters:  
 Application in Heterogeneous Catalysis..... 263  
 Mater. Trans., 40[11] (2001) pp.2180-2183  
 Rodion Vladimirovich Belosludov, Seiichi Takami, Momoji Kubo,  
 Akira Miyamoto and Yoshiyuki Kawazoe
33. First-Principles Study of the Magic  $\text{Ar}_6\text{Fe}^+$  Cluster..... 267  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2172-2174  
 Qian Wang, Qiang Sun, Tina Marie Briere and Yoshiyuki Kawazoe
34. Bonding Character of Hydrogen in Aluminum Clusters..... 270  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2175-2179  
 Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
35. Comparison between the Full Frequency Integration and the GPP Model in  
*Ab-Initio GW* Calculation of Na Clusters..... 275  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2150-2152  
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
36. Molecular Scale Rectifier: Theoretical Study..... 278  
 J. Phys. Chem. A, 105[41] (2001) pp.9454-9459  
 Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

37. First-principles Study on High Speed Collisions between Neon Atom and Carbon Cluster..... 284  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1125-1128  
 Tsuguo Morisato, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Takashi Miura and Lee Sang-Moo
38. *Ab Initio* Modelling of Real Molecular Logic Devices..... 288  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2270-2275  
 Junqiang Lu, Hao Chen, Jian Wu, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
39. Direct Simulation Monte Carlo for Cluster Growth Process in Rarefied Gas..... 294  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2295-2298  
 Ying Jin, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
40. Effect of Elastic Interaction on Self-assembled Island Spatial Arrangement..... 298  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2279-2282  
 Sornthep Vannarat, Keivan Esfarjani, Siu-Tat Chui and Yoshiyuki Kawazoe
41. Structure Similarity of Mixed Buoyancy-thermocapillary Flow in Half-zone Liquid Bridge..... 302  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2322-2331  
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kazuyuki Higashino, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
42. First-principles Study of Solute-dislocation Interaction in Aluminum-rich Alloys..... 312  
 Phys. Rev. B, 64[22] (2001) pp.2242031-2242038  
 Sornthep Vannarat, Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
43. Elastic Moduli and Absolute Stability Limits of Clathrate Hydrates of Structure I at Positive and Negative Pressures..... 320  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2194-2200  
 Vladimir Romanovich Belosludov, Talgat Muratovich Inerbaev, Natalya Dmifrievna Luzhkovskaya and Yoshiyuki Kawazoe

44. *Ab-Initio* Molecular Dynamics Study of Isomers of Tin Clusters..... 327  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1105-1108  
 Chiranjib Majumder, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
45. Effect of Hydrostatic Pressure on Single Wall Carbon Nanotube Bundles... 331  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1151-1153  
 Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
46. Analysis of C<sub>60</sub> Insertion into Single Wall Carbon Nanotube  
 by Molecular Dynamics Simulation..... 334  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1163-1165  
 Takafumi Ishii, Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Yoshiyuki Kawazoe  
 and Sumio Iijima
47. Small Clusters of Tin: Atomic Structures, Energetics and  
 Fragmentation Behavior..... 337  
 Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.2334051-2334054  
 Chiranjib Majumder, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe
48. Cluster Growth Processes by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 341  
 Appl. Phys. A, 73 (2001) pp.731-735  
 Hiroshi Mizuseki, Ying Jin, Yoshiyuki Kawazoe and Luc Theo Wille
49. Application of Single-walled Carbon Nanotube Body to Unique  
 Emitter: a First-principles Study..... 346  
 Chem. Phys. Lett., 350 (2001) pp.386-392  
 Gang Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
50. Structural Deformation of Single-walled Carbon Nanotubes and Fullerene  
 Encapsulation Due to Magnetized-plasma Ion Irradiation..... 353  
 Appl. Phys. Lett., 79[25] (2001) pp.4213-4215  
 Goo-Hwan Jeong, Rikizo Hatakeyama, Takamichi Hirata,  
 Kazuyuki Tohji, Kenichi Motomiya, Noriyoshi Sato and  
 Yoshiyuki Kawazoe

51. Incorporation of Sb Atom and Fullerene by Using Nuclear Recoil and Their MD Simulation..... 356  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 26[4] (2001) pp.1159-1162  
 Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga and Yoshiyuki Kawazoe
52. Formation of N-doped C<sub>60</sub> Studied by *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulations..... 360  
 Mater. Trans., 42[11] (2001) pp.2189-2193  
 Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno, Tustomu Ohtsuki and Yoshiyuki Kawazoe
53. Spin-tunneling Time in a Hybrid Semimagnetic/Semiconductor Heterostructure with a Single Paramagnetic Layer..... 365  
 Phys. Lett. A, 291 (2001) pp.453-458  
 Yong Guo, Bin Wang, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
54. Asymmetry and Separation of Spin Tunneling Time in ZnSe/Zn<sub>1-x</sub>MnxSe Multilayers..... 371  
 Eur. Phys. J. B, 23 (2001) pp.509-513  
 Yong Guo, Bin Wang, Bin-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
55. R-dependency of the Hardness of Perovskite-type RRh<sub>3</sub>B Compounds (R=La, Gd, Lu and Sc) ..... 376  
 Jpn. J. Appl. Phys., 40 (2001) pp.6037-6038  
 Toetsu Shishido, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Jinhua Ye, Akira Yoshikawa, Takahiko Sasaki, Masaoki Oku, Hiroyuki Horiuchi, Iwami Higashi, Shigemi Kohiki, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima
56. Rotational Motion of Methane within the Confines of Zeolite NaCaA: Molecular Dynamics and *Ab Initio* Calculations..... 378  
 Phys. Rev. E., 65 (2001) pp.112031-112036  
 A. V. Anil Kumar, Subramanian Yashonath, Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
57. Interfacial Segregation of Early Transition Metals in Nickel Aluminide... 384  
 Mater. Trans., 42[3] (2001) pp.407-410  
 Hai-Ping Wang, Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

58. Interlayer Exchange Coupling in Fine-layered Fe/Au Superlattices..... 388  
 Phys. Rev. B., 63 (2001) pp.1004051-1004054  
 Akira Yoshihara, Jian-Tao Wang, Koki Takanashi, Kiyokazu Himi,  
 Yoshiyuki Kawazoe, Hiroyasu Fujimori and Peter Grunberg
59. Resonant Inelastic X-ray Scattering from Charge and Orbital Excitations  
 in Manganites..... 392  
 Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.144141-144148  
 Hiroshi Kondo, Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa
60. Effects of Spin and Orbital Degeneracy on the Thermopower of Strongly  
 Correlated Systems..... 400  
 Phys. Rev. Lett., 87[23] (2001) pp.2366031-2366034  
 Wataru Koshibae and Sadamichi Maekawa
61. Nonlinear Optical Response in Mott Insulators..... 404  
 J. Luminescence., 94-95 (2001) pp.659-662  
 Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
62. Electronic States in the Antiferromagnetic Phase of Electron-doped  
 High- $T_c$  Cuprates..... 408  
 Phys. Rev. B, 64 (2001) pp.2125051-2125054  
 Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
63. Large Third-order Optical Nonlinearity of Cu-O Chains Investigated by  
 Third-harmonic Generation  
 Spectroscopy..... 412  
 Phys. Rev. Lett., 87[17] (2001) pp.1774011-1774014  
 H. Kishida, M. Ono, K. Miura, H. Okamoto, M. Izumi, T. Manako,  
 M. Kawasaki, Y. Taguchi, Y. Tokura, T. Tohyama, K. Tsutsui and S. Maekawa



<2002 年>

1. Usefulness of Experiments with Model Fluid for Thermocapillary Convection  
–Effect of Prandtl Number on Two-dimensional Thermocapillary  
Convection..... 416  
J. Cryst. Growth, 234 (2002) pp.272-278  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda,  
Yoshiyuki Kawazoe and Kazuyuki Higashino
  
2. First-principles Calculation of Coincidence Doppler Broadening of  
Positron Annihilation  
Radiation..... 423  
Phys. Rev. B, 65[4] (2002) pp.4510801-4510810  
Zeng Tang, Masayuki Hasegawa, Yasuyoshi Nagai, Mineo Saito  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
3. Magic Behavior and Bonding Nature in Hydrogenated Aluminum  
Clusters..... 433  
Phys. Rev. B, 65[4] (2002) pp.4540601-4540611  
Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
  
4. Qualitative and Quantitative Descriptions on the Localized Electronic  
Structure in Single-walled Carbon  
Nanotubes..... 444  
J. Chem. Phys., 116[5] (2002) pp.2284-2288  
Gang Zhou, Wenhui Duan, Binglin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
  
5. Metal-encapsulated Icosahedral Superatoms of Germanium and Tin  
with Large Gaps: Zn@Ge<sub>12</sub> and Cd@Sn<sub>12</sub>..... 449  
Appl. Phys. Lett., 80[5] (2002) pp.859-861  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Structures and Stability of Al<sub>7</sub>C and Al<sub>7</sub>N  
Clusters..... 452  
Eur. Phys. J. D, 18 (2002) pp.77-81  
Qiang Sun, Qian Wang, Xin Gao Gong, Vijay Kumar and  
Yoshiyuki Kawazoe

7. Magic Behavior of  $\text{Si}_{15}\text{M}$  and  $\text{Si}_{16}\text{M}$  (M=Cr, Mo, and W)  
Clusters..... 457  
Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.734041-734044  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Atomic and Electronic Structures of Niobium  
Clusters..... 461  
Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.12540301-12540311  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Prediction of the Mixing Enthalpy of  
Alloys..... 472  
Europhys. Lett., 57[4] (2002) pp.526-532  
Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Se Atom Incorporation in Fullerenes by Using Nuclear Recoil and  
*Ab Initio* Molecular Dynamics  
Simulation..... 479  
Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.734021-734024  
Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Yoshiyuki Kawazoe and  
Hideyuki Yuki
  
11. Band Structures of Perovskite-like Fluorides for Vacuum-Ultraviolet  
-Transparent Lens  
Materials..... 483  
Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.L365-L367  
Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki,  
Yoshiyuki Kawazoe, Dorota Anna Pawlak, Kiyoshi Shimamura and  
Tsuguo Fukuda
  
12. Anomalous Magnetic Moments of  $\text{Mn}_{13}$  and  $\text{Mn}_{19}$   
Clusters..... 486  
Mater. Trans., 43[3] (2002) pp.424-427  
Tina Marie Briere, Marcel Henricus Franciscus Sluiter, Vijay Kumar and  
Yoshiyuki Kawazoe

13. Emission Probabilities of  $\pi$  Electrons in Carbon Nanotubes..... 490  
 Appl. Phys. Lett., 80[11] (2002) pp.1999-2001  
 Gang Zhou, Wenhui Duan, Binglin Gu and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. All-electron Mixed-Basis Calculation of Structurally Optimized Titanium Nitride Clusters..... 493  
 Mater. Trans., 43[3] (2002) pp.482-484  
 Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Kaoru Ohno,  
 Marcel Henricus Franciscus Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Density Functional Study on Metastable BCC Copper: Electronic Structure and Momentum Density of Positron-electron Pairs..... 496  
 Phys. Rev. B, 65 (2002) pp.1951081-1951088  
 Zeng Tang, Masayuki Hasegawa, Yasuyoshi Nagai and Mineo Saito
  
16. Hybrid Model Simulation of the Cluster Deposition Process..... 504  
 J. Cryst. Growth, 236 (2002) pp.429-433  
 Kenta Hongo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Luc Theo Wille
  
17. Theoretical Approach of Phase Selection in Refractory Metals and Alloys..... 509  
 J. Alloys Compd., 334 (2002) pp.27-33  
 Berne Cecil, Marcel Henricus Fransiscus Sluiter and Alain Pasturel
  
18. Theoretical Study on Inclusion Complex of Polyaniline Covered by Cyclodextrins for Molecular Device..... 516  
 Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.2739-2741  
 Rodion Vladimirovich Belosludov, Hiroshi Mizuseki,  
 Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
19. Theoretical Analysis for a Molecular Resonant Tunneling Diode..... 519  
 Jpn. J. Appl. Phys., 41 (2002) pp.2770-2773  
 Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe



### III. 国際会議発表論文

#### <2000 年>

1. Thermodynamic Modeling of Hydrogen Solubility in Fe, Co and Ni..... 539  
Calphad X X IX(Massachusetts Institute of Technology), Abstract  
Cambridge, Massachusetts (2000.6.18-23) p.99  
Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Qiang Wang, Utako Onose, Yoko Akiyama and  
Yoshiyuki Kawazoe
2. The Pattern of Three-dimensional Thermocapillary Convection..... 540  
HTC-2000 (High Temperature Capillarity Third International Conference),  
Kurashiki, Japan (2000.11.19-22) pp.463-468  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda  
Kazuyuki Higashino and Yoshiyuki Kawazoe
3. Green and Yellow Luminescence from  $Zn_2SiO_4:Mn^{2+}$  Created Using Porous  
Silicon as Template..... 546  
The 6th International Conference on the Science and Technology of  
Display Phosphors, San Diego, USA (2000.11.6-8) pp.45-48  
N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, T. Yao, Y. Kawazoe,  
A. Yamamoto and T. Goto

#### <2001 年>

1. Thermodynamic Stability of GaAs/InAs Heterostructure..... 550  
SSDM2001 (International Conference on Solid State Devices and Materials),  
Tokyo, Japan (2001.9.26-28) pp.364-365  
Sornthep Vannarat, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
2. Theoretical Study on Inclusion Complex of Polyaniline Covered by  
Cyclodextrins for Molecular Device..... 552  
SSDM2001 (International Conference on Solid State Devices and Materials),  
Tokyo, Japan (2001.9.26-28) pp.632-633  
Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki and  
Yoshiyuki Kawazoe

3. Theoretical Analysis for a Molecular Resonant Tunneling Diode..... 554  
 SSDM2001 (International Conference on Solid State Devices and Materials),  
 Tokyo, Japan (2001.9.26-28) pp.668-669  
 Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
4. Lattice Relaxation in Nanocrystalline BaTiO<sub>3</sub> Particles..... 556  
 IMF-10 (ABSTRACTS of the 10th International Meeting on  
 Ferroelectricity) Madrid, Spain (2001.9.3-7) p. 219 PS4C-61  
 S. Tsunekawa, K. Ishikawa, H. Suzuki and Y. Kawazoe
  
5. Studies on Recovery Technique of Cementitious Materials  
 by Freeze-drying Method..... 557  
 26th Conference on Our World in Concrete & Structures,  
 Singapore, (2001.8.27-28) pp.567-572 (Invited Talk)  
 R. Sakurada, K. Maruyama, I. Kuroshima, H. Takeuchi, Jing-Zhi Yu and  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
6. How to Realize Prediction of Materials Properties by Computer  
 Simulation..... 563  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) pp.7-8 (Invited Talk)  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Novel Caged Clusters of Silicon: Fullerenes, Frank-Kasper Polyhedra and  
 Cubic..... 564  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) p.9 (Invited Talk)  
 Vijay Kumar
  
8. First Principles Studies of Nano-structures of Silicon..... 565  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) p.21  
 Q. Sun, Q. Wang, T. M. Briere, V. Kumar, P. Jena and Y. Kawazoe

9. Small Tin Clusters: An *Ab-Initio* Study of Neutral and Cation Clusters..... 566  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) p.29  
 C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
10. Anomalous Magnetic Moments of Manganese Clusters..... 567  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) p.36  
 T. M. Briere, M. Sluiter, V. Kumar and Y. Kawazoe
11. Phase Transitions in Arm-chair and Zig-zag Type Single Wall Carbon  
 Nanotube Crystals under Pressure..... 568  
 ACCMS-1 (Asian Consortium for Computational Materials Science),  
 Bangalore, India (2001.11.29-12.1) p.40 (Invited Talk)  
 Vijay Kumar, M. Sluiter and Y. Kawazoe
12. Density Functional Study on Adsorption of Small Molecules on  
 Fe-based Clusters..... 569  
 IPAP Conference Series 3 (Proceedings of the International Symposium on  
 Cluster Assembled Materials),  
 Nagoya, Japan (2001.6.9-10) pp.168-171  
 Rodion V. Belosludov, Seiichi Takami, Momoji Kubo and Akira Miyamoto  
 and Yoshiyuki Kawazoe
13. Geometric and Electronic Structures of Neutral and Charged Tin Clusters  
 (n=2-13) ..... 573  
 IPAP Conference Series 3 (Proceedings of the International Symposium on  
 Cluster Assembled Materials),  
 Nagoya, Japan (2001.6.9-10) pp.154-157  
 Chiranjib Majumder, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki and  
 Yoshiyuki Kawazoe





19. Blue Shifts in Ultraviolet Absorption Spectra of Oxide Nanoparticles  
-CeO<sub>x</sub> and SnO<sub>y</sub> ..... 594  
IPAP Conference Series 3 (Proceedings of the International Symposium on  
Cluster Assembled Materials),  
Nagoya, Japan (2001.6.9-10) pp.88-92  
Shin Tsunekawa, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
20. Advanced Materials Design by Computer Simulation Based on the First  
Principles Calculations and Modelling ..... 599  
Asia Academic Seminar on New Materials,  
Hyderabad, India (2001.12.12-21) p.8 (Invited Talk)  
Yoshiyuki Kawazoe
21. Pressure Induced Structural Transition in Single Wall Carbon  
Nanotube Bundles ..... 600  
CSW2001 (Computational Science Workshop),  
Tsukuba, Japan (2001.3.11-13) p.35  
Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
22. Geometric and Electronic Structure Calculations for a  
Molecular Resonant Tunneling Diode ..... 601  
CSW2001 (Computational Science Workshop),  
Tsukuba, Japan (2001.3.11-13) p.36  
Chiranjib Majumder, Tina Marie Briere, Hiroshi Mizuseki  
and Yoshiyuki Kawazoe
23. Structures and Stabilities of Magic Transition Metal Oxide Clusters ..... 602  
CSW2001 (Computational Science Workshop),  
Tsukuba, Japan (2001.3.11-13) pp.51-52  
Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
24. Spin-configuration and Electron-interaction Effects on Transport Characteristics  
of Doped Nanotubes Junctions ..... 604  
Carbon Nanotube 10 Conference, Tsukuba, Japan (2001.10.3-5) p.95  
A. A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

25. Spin-configuration and Electron-interaction Effects on Transport through Doped Nanotubes Junctions..... 605  
Nanotubes & Nanostructures 2001, Italy (2001.10.25-27) p.66  
A. A. Farajian, K. Esfarjani, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
26. Multiscale Simulation of Cluster Growth and Deposition Processes by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 606  
E-MRS2001 (European Materials Research Society Spring Meeting), Abstract  
Strasbourg, France (2001.6.5-8) p.A-4  
H. Mizuseki, K. Hongo, Y. Kawazoe and L. T. Wille
27. Plasma-assisted Encapsulation of Alkali Metals and Fullerenes Inside Single-walled Carbon Nanotubes..... 607  
Abstracts of the 21th Fullerene General Symposium, Abstract  
Tsukuba, Japan (2001.7.25-27) p.116  
G. -H. Jeong, R. Hatakeyama, T. Hirata, K. Tohji, K. Motomiya and  
Y. Kawazoe
28. Beyond the Standard Ab Initio Calculations to Enable Simulation of Real Physico-chemical Properties and Reactions..... 608  
IPMM-2001 (Intelligent Processing and Manufacturing of Materials,  
Third International Conference),  
Vancouver British Columbia, Canada (2001.7.29-8.3) (Invited Talk)  
Yoshiyuki Kawazoe
29. Lattice Dynamics Simulations of Resonant Scattering of Lattice Phonons of Clathrate Compounds by Guests Atoms..... 613  
IPMM-2001 (Intelligent Processing and Manufacturing of Materials,  
Third International Conference),  
Vancouver British Columbia, Canada (2001.7.29-8.3)  
V. R. Belosludov, V. P. Shpakov, R. V. Belosludov, N. D. Luzhkovskaya,  
Y. Kawazoe and J. S. Tse

30. Combination of Phenomenological Model and First-Principles Study -- An Application to Theoretical Analyses of Hydrogen Solubility in Magnetic Metals..... 621  
 IPMM-2001 (Intelligent Processing and Manufacturing of Materials )  
 Vancouver British Columbia, Canada (2001.7.29-8.3)  
 J. -Z. Yu, Q. Sun, Q. Wang, Y. Kawazoe and John A. Meech
31. Numerical Study of Fluoride Crystal Growth by Czochralski Technique•• 630  
 ICCG-13/ICVGE-11 (The Thirteenth International Conference on Crystal Growth in Conjunction with The Eleventh International Conference on Vapor Growth and Epitaxy)  
 Kyoto, Japan (2001.7.30-8.4) p.507  
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
32.  $Zn_2SiO_4:Mn^{2+}$  Nano-particles Grown in Porous Silicon..... 631  
 9th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology"  
 St Petersburg, Russia (2001.6.18-22) p.436-438  
 N. Taghavinia, G. Lerondel, H. Makino, A. Yamamoto, T. Yao, Y. Kawazoe and T. Goto
33. Porous Silicon as a Template for Silicate Phosphor Synthesis..... 634  
 Asia Display/ IDW'01 (The 21st International Display Research Conference in Conjunction with The 8th International Display Workshops)  
 Nagoya, Japan (2001.10.16-19) p.1143-1146  
 N. Taghavinia, H. Makino, G. Lerondel, A. Yamamoto, T. Yao, Y. Kawazoe and T. Goto
34. Spin Valve Effect in Magnetically Doped Nanotube-based Transistors..... 638  
 ISNM 2001(International Symposium on Nanonetwork Materials: Fullerenes, Nanotubes, and Related Systems),  
 Kamakura, Japan (2001.1.15-18) pp.253-256  
 Keivan Esfarjani, Zhen Chen, Amir Abbas Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

35. Analysis of C<sub>60</sub> Insertion into Single Wall Carbon Nanotube by Molecular Dynamics Simulation..... 642  
ISNM 2001(International Symposium on Nanonetwork Materials: Fullerenes, Nanotubes, and Related Systems),  
Kamakura, Japan (2001.1.15-18) pp.237-240  
Takafumi Ishii, Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Yoshiyuki Kawazoe and Sumio Iijima

<2002 年>

1. Material Design of Fluoride Single Crystals for Next Generation  
Vacuum-ultraviolet Transmission..... 646  
International Forum on Science and Technology of Crystal Growth,  
Sendai, Japan (2002.3.4-5) p.P-T-03  
N. Terakubo, T Nishimatsu, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, D. A. Pawlak,  
K. Shimamura and T. Fukuda
  
2. Unsteady Convection of LiCaAlF<sub>6</sub> Melts in the Czochraski Crystal  
Growth..... 647  
International Fourum on Science and Technology of Crystal Growth,  
Sendai, Japan (2002.3.4-5) p.P-T-04  
Z. Zeng, H. Mizuseki, J. Q. Chen, K. Shimamura, T. Fukuda and Y. Kawazoe
  
3. Atomic-scale Formation Mechanisms of Nanostructures on Surface..... 648  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.7  
K. H. Wu, J. T. Wang, T. Sakurai and E. G. Wang
  
4. Novel Metal Encapsulated Silicon Clusters and Magnetism in  
Nanoparticles of Non-magnetic Elements..... 649  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.10  
Vijay Kumar
  
5. Sodium Adsorption on Si (111) 7×7..... 650  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.15  
T. M. Briere, V. Kumar, Y. Kawazoe, K. Wu and T. Sakurai
  
6. Structure, Stability, and Origin of Bi Dimer Linear Chains on  
Si (001) Surfaces..... 651  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.26  
Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Tomihiro Hashizume  
and Ding-Sheng Wang

7. Adsorption of Alkali Metals on the Si (111) -7×7 Surface:  
a Two-stage Picture..... 652  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.27  
K. H. Wu, M. Ono, K. Nakayama, T. Nagao, Q. -K. Xue, E. G. Wang,  
T. M. Briere, V. Kumar, Y. Kawazoe and T. Sakurai
  
8. Adsorption of Thiophene on the Au (111) Surface: First Principles Molecular  
Dynamics Study..... 653  
Dr. Rohrer's JSPS Award Workshop, Sendai, Japan (2002.3.5-6) p.30  
C. Majumder, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
9. Novel Metal Encapsulated Silicon Cage Clusters..... 654  
March Meeting 2002 (Bulletin of the American Physical Society),  
Indianapolis, USA (2002.3.18-22) p.100 (Invited Talk)  
Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Multiscale Modeling on Cluster Deposited Thin Film..... 655  
March Meeting 2002 (Bulletin of the American Physical Society),  
Indianapolis, USA (2002.3.18-22) p.813  
Hiroshi Mizuseki, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille
  
11. Simulation Study on Structure and Electrical Conductivity of  
Aromatic Molecules for Nanoscale Device..... 656  
MRS 2002 (Spring Meeting), San Francisco, USA (2002.4.1-5) p.268  
Hiroshi Mizuseki, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov,  
Amir A. Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Hybrid Model Simulation on Cluster Growth and Deposition Processes... 657  
MRS 2002 (Spring Meeting), San Francisco, USA (2002.4.1-5) p.395  
Hiroshi Mizuseki, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Luc T. Wille
  
13. Dependence of Structural Modification of Single-Walled Carbon Nanotubes  
on Plasma-Ion Irradiation Energy..... 658  
Abstracts of 22nd Fullerene General Symposium, Abstract  
Okazaki, Japan (2002.1.9-11) p.114  
G. -H. Jeong, T. Hirata, R. Hatakeyama, T. Tohji, K. Motomiya and  
Y. Kawazoe

14. Effects of Bias-Voltage Application on Single-walled Carbon-nanotube Bundles in Magnetized Plasmas..... 659  
PSS-2001 (Proceedings of Plasma Science Symposium 2001) / SPP-18  
(The 18th Symposium on Plasma Proceeding), Kyoto, Japan (2002.1.24-26)  
pp.731-732  
Goo-Hwan Jeong, Rikizo Hatakeyama, Takamichi Hirata, Kazuyuki Tohji,  
Kenichi Motomiya, Yoshiyuki Kawazoe and Noriyoshi Sato
15. Structure Deformation of Single-walled Carbon Nanotubes Due to Plasma Ion Irradiation..... 661  
Abstracts of the 20th Fullerene General Symposium  
Okazaki, Japan (2001.1.22-23)  
Rikizo Hatakeyama, Goo-Hwan Jeong, Takamichi Hirata, Kazuyuki Tohji,  
Kenichi Motomiya, Yoshiyuki Kawazoe and Noriyoshi Sato  
※ 2001 年の発表だが誤って 2002 年度分として収録
16. Electronic States and Superconductivity in Multi-layer High-Tc Cuprates • 662  
March Meeting 2002 (Bulletin of the American Physical Society),  
Indianapolis, USA (2002.3.18-22)  
p.1128  
Michiyasu Mori, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
17. Ab Initio Calculation Applied to Nanomaterial..... 663  
第13回中国全国半導体物理年会  
江蘇省蘇州市、中国(2002.10.26-29)  
p.2 (Invited Talk)  
Q. Sun and Y. Kawazoe

#### IV. 紀要等

1. 理論・シミュレーション・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 665  
戦略的基礎研究推進事業「極限環境状態における現象」  
研究終了報告書 (2001) pp.455-469  
川添良幸、水関博志
2. セメントの水和生成物の形成過程に関する数値シミュレーション・・・・・・・・ 680  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
P.111  
桜田良治、余 京智、川添良幸
3. 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・・・・・・・・ 681  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
PP.155-156  
近藤 保、寺寄 亨、市橋正彦、安松久登、川添良幸
4. 絶縁体結晶中を動きまわる銅原子の研究・・・・・・・・・・・・・・・・ 683  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
P.212  
長坂慎一郎、高橋良雄、大野かおる、川添良幸
5. シクロデキストリン中の単一分子の電子状態・・・・・・・・・・・・・・・・ 684  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
P.240  
吉成武久、高橋宣章、Ye Chang Jun、川添良幸
6. 光電子分光スペクトルの第一原理計算・・・・・・・・・・・・・・・・ 685  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
P.279  
大野かおる、志賀圭一郎、川添良幸
7. プラズマガス凝縮法によるクラスター生成の最適化・・・・・・・・ 686  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
PP.281-282  
隅山兼治、日原岳彦、川添良幸、水関博志



8. 超微粒子形成過程の計算科学的解析..... 688  
平成 13 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2002.6)  
P.283  
池庄司民夫、及川勝成、蔣 明淑、川添良幸

## V. 予稿集・講演・研究会等

### <2001 年> 予稿集

1. Phase Transformations in Single Wall Carbon Nanotube Bundles  
under Pressure..... 689  
第 21 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
つくば (2001.7.25-27) p.106 No.2P-22  
Vijay Kumar, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
2. Hydrogenation of Single Graphitic Sheets and of Single Wall Carbon  
Nanotubes..... 690  
第 21 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
つくば (2001.7.25-27) p.113 No.2P-29  
Marcel H. F. Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. Plasma-assisted Encapsulation of Alkali Metals and Fullerenes inside  
Single-walled Carbon Nanotubes..... 691  
第 21 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
つくば (2001.7.25-27) p.116 No.2P-32  
G.-H. Jeong, R. Hatakeyama, T. Hirata, K. Tohji, K. Motomiya and  
Y. Kawazoe
4. 第一原理計算による格子欠陥の研究現状と将来展望..... 692  
第 11 回格子欠陥フォーラム高欠陥濃度状態講演概要集 鳴門  
(2001.9.15-16) pp.167-176  
川添良幸、大野かおる、Marcel Sluiter、水関博志、西松毅、曾忠
5. フラーレン硫黄化合物の局在量子構造と光触媒反応..... 702  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.164 No.S8・23  
高橋英志、松原英一郎、Rodion Belosludov、川添良幸、佐藤修彰、  
村松淳司、松原誠二郎、田路和幸

6. **Electronic Structure and Stability of Approximants of the New Class of Stable Binary Quasicrystals Cd<sub>6</sub>Ca**..... 702  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.289 No.274  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
7. **繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる Cu-Au 系状態図計算**... 703  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.407 No.636  
佐原亮二、水関博志、M. H. F. Sluiter、大野かおる、川添良幸、久保紘
8. **全電子混合基底法による窒化チタンクラスターの安定構造計算**..... 703  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.407 No.637  
裊栄造、長内弘喜、大野かおる、Marcel Sluiter、川添良幸
9. **階層的シミュレーションによるクラスター成長過程に関する研究**..... 703  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.407 No.638  
本郷研太、水関博志、川添良幸
10. **Anomalous Magnetic Moment of Mn<sub>18</sub>, Mn<sub>19</sub> and Mn<sub>20</sub> Clusters**..... 704  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.408 No.640  
T. M. Briere, M. Sluiter and Y. Kawazoe
11. **BCT Fe の磁気構造**..... 704  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.408 No.641  
王建涛、水関博志、川添良幸
12. **第一原理計算による次世代リソグラフィ技術用硝材の探索**..... 705  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.452 No.775  
寺久保憲昭、西松毅、水関博志、川添良幸、Dorota A. Pawlak、  
島村清史、福田承生

13. Si (001) 表面にある Bi ダイマラインの構造及び電子的性質…………… 705  
日本金属学会講演概要 秋期大会 第 129 回  
九州産業大学 1 号館 (2001.9.22-24) p.484 No.871  
王建涛、水関博志、川添良幸
14. 磁化プラズマによるアルカリ金属/フラーレン接合を内包した  
カーボンナノチューブの形成…………… 706  
第 62 回応用物理学会学術講演会  
愛知工業大学 (2001.9.11-14) p.96 No.1  
鄭求桓、畠山力三、平田孝道、田路和幸、川添良幸
15. 導電性高分子配線の電気伝導シミュレーション研究  
第 62 回応用物理学会学術講演会…………… 707  
愛知工業大学 (2001.9.11-14) p.954 No.12a-A-13  
Hiroshi Mizuseki, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov,  
Amir Abbas Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen and Yoshiyuki Kawazoe
16. Three-dimensional Unsteady Convection of LiCAF Melt in Czochralski Crystal  
Growth…………… 708  
第 62 回応用物理学会学術講演会  
愛知工業大学 (2001.9.11-14) p.204 No.11P-S-6  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Tsuguo Fukuda  
and Yoshiyuki Kawazoe
17. 第一原理計算による分子デバイス設計…………… 709  
第 1 回多元物質科学研究所研究発表会  
東北学院大学、東北大学 (2001.11.8) p.101 No.B47  
Hiroshi Mizuseki, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov,  
Amir Abbas Farajian, Jian-Tao Wang, Hao Chen and Yoshiyuki Kawazoe
18. 第一原理 GW 近似によるアルカリ金属クラスターの  
準粒子エネルギー計算…………… 707  
日本物理学会講演概要集 第 56 回 秋季大会  
徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.747 No.19aWD-7  
石井聡、大野かおる、川添良幸

19. 第一原理全電子混合基底法によるSi/SiO<sub>2</sub>界面の研究..... 711  
 日本物理学会講演概要集 第56回 秋季大会  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.753 No.19pPSB-1  
 森里嗣生、大野かおる、川添良幸
20. 半導体中の点欠陥の第一原理計算..... 712  
 日本物理学会講演概要集 第56回 秋季大会  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.800 No.18pTG-7  
 西松毅
21. 第一原理による Bethe-Salpeter 方程式の精密計算  
 日本物理学会講演概要集 第56回 秋季大会..... 714  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.747 No.19aWD-6  
 大野かおる
22. Interactions between Group 11 Metals with Conjugated Molecular Wires• 715  
 金属材料研究所 第102回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.20  
 C. Majumder, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
23. Theoretical Study Guest Effect on Stability of Different Cagelike  
 Structures of Large Water Clusters..... 716  
 金属材料研究所 第102回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.21  
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
24. 全電子混合基底法によるシリコン自己格子間原子の  
 XPS スペクトルの予想..... 717  
 金属材料研究所 第102回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.22  
 西松毅、Marcel Sluiter、水関博志、川添良幸、上原正光、佐藤譲
25. Electronic Structure of Single Wall Carbon Nanotubes under Compression  
 as Compared to Graphite and other Graphene Stackings..... 719  
 金属材料研究所 第102回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.23  
 Marcel H. F. Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

26. Convection Control in Czochralski Crystal Growth Technique..... 719  
金属材料研究所 第 102 回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.24  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Shimamura, Touetsu Shishido,  
Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe
27. 次世代紫外光透過フッ化物単結晶の設計..... 720  
金属材料研究所 第 102 回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.25  
寺久保憲昭、西松毅、川添良幸、Dorota A. Pawlak、島村清史、  
福田承生、水関博志
28. 各計算機での Gaussian98 による分子デバイス設計実行速度測定..... 721  
金属材料研究所 第 102 回講演会 秋季講演会 (2001.11.29-30) p.48  
五十嵐伸昭、水関博志、Chiranjib Majumder、Rodion V. Belosludov、  
Amir Abbas Farajian、Jian-Tao Wang、Hao Chen、川添良幸
29. Applications of the Kikuchi Cluster Variation Method..... 722  
日本学術振興会 合金状態図 第 172 委員会 第 2 回研究会資料  
仙台 (2001.11.16-17) pp.45-47  
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
30. 電子励起状態における反応・衝突過程..... 725  
第 5 回理論化学討論会講演要旨集  
仙台 (2001.5.17-19) p.48 No.3O03A  
大野かおる、Jian Wu、川添良幸
31. All-electron Mixed Basis Approach: a New Platform for  
First Principles Calculations..... 726  
第 2 回理論化学最前線-理論と応用  
岡崎 (2001.12.17-19) p.73 No.P30  
Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
32. ペロブスカイト型フッ化物  $ABF_3$  のバンド構造..... 727  
第46回人工結晶討論会 講演要旨集  
名古屋 (2001.12.3-4) p.19-20 No. 1A6  
寺久保憲昭、西松毅、水関博志、川添良幸、Dorota A. Pawlak、  
島村清史、福田承生

33. ジョセフソン接合系でのスピнкаレントの理論..... 729  
 日本物理学会講演概要集 第 56 回 年次大会  
 中央大学多摩キャンパス (2001.3.27-30) p.417 No. 28pYB-13  
 山下太郎、高橋三郎、今村裕志、小山富男、前川禎通
34. 二次元モット絶縁体の光励起状態と非線形光学応答..... 730  
 日本物理学会講演概要集 第 56 回 秋季大会  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.619 No.19RE-8  
 高橋亮、遠山貴己、前川禎通
35. 二次元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..... 731  
 日本物理学会講演概要集 第 56 回 秋季大会  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.747 No.19RE-9  
 小野寺啓祥、筒井健二、遠山貴己、前川禎通
36. 多層系高温超伝導体の準粒子スペクトル..... 732  
 日本物理学会講演概要集 第 56 回 秋季大会  
 徳島文理大学徳島キャンパス (2001.9.17-20) p.428 No.18pYB-3  
 森道康、遠山貴己、前川禎通
37. 酸化物超電導線の熱的安定性の温度依存症..... 733  
 第 64 回 2001 年度春季低温工学・超伝導学会  
 明星大学 (2001.5.16-18) p.182 No.E2-15  
 西島元、吉田寛和、若狭強志、瀬戸寿之、淡路智、渡辺和雄、  
 村瀬暁、島本進

<2002 年> 予稿集

1. Predictions of Deformation of Carbon Nanotubes and Silicon Fullerenes  
 by the First Principles Simulations..... 734  
 第 22 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
 岡崎 (2002.1.9-11) p.10 No.3S-10  
 Yoshiyuki Kawazoe

2. Dependence of Structural Modification of Single-walled Carbon Nanotubes on Plasma-ion Irradiation Energy..... 735  
 第 22 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
 岡崎 (2002.1.9-11) p.114 No.3P-60  
 G.-H. Jeong, T. Hirata, R. Hatakeyama, K. Tohji, K. Motomiya and  
 Y. Kawazoe
  
3. *Ab-initio* Study of Cs-doped Carbon Nanotubes..... 736  
 第 22 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集  
 岡崎 (2002.1.9-11) p.114 No.3P-66  
 A. A. Farajian, G.-H. Jeong, R. Hatakeyama, T. Hirata, H. Mizuseki and  
 Y. Kawazoe
  
4.  $CeO_x$  巨大クラスターの格子サイズの粒径依存性..... 737  
 第 19 回希土類討論会  
 大阪大学 (2002.5.23) pp.48-49 No.1B-05  
 恒川信、J.-T. Wang、川添良幸
  
5. 仏教文献の自動認識による仏教の歴史解明および炭素  
 14 年代測定による日持上人の中国布教の真実に迫る..... 739  
 日本化学会第 81 春季年会市民公開講座講演  
 早稲田大学 (2002.3.26-29) p.A-14 No.3S1-07 特別講演  
 川添良幸
  
6. 第一原理分子軌道法によるベンゼンの導電性評価..... 740  
 第 49 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
 東海大学 (2002.3.27-30) p.1241 No.27p-M-7  
 H. Chen、J. Q. Lu、J. Wu、野手竜之介、水関博志、川添良幸
  
7. 第一原理計算によるフラーレンを用いた分子太陽電池の評価..... 740  
 第 49 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
 東海大学 (2002.3.27-30) p.1241 No.27p-M-8  
 水関博志、五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、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…… 741  
第 49 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
東海大学 (2002.3.27-30) p.1242 No.27p-M-9  
Chiranjib Majumder、水関博志、川添良幸
9. PNX 分子による分子整流器シミュレーション研究…………… 742  
第 49 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
東海大学 (2002.3.27-30) p.1252 No.29a-V-2  
新村健二、水関博志、Chiranjib Majumder、川添良幸
10. 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・ 743  
第 49 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
東海大学 (2002.3.27-30) p.1253 No.29a-V-3  
佐藤博之、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
11. 金属をドーブした単層ナノチューブの研究…………… 744  
日本金属学会講演概要 第 130 回 春期大会  
東京理科大学神楽坂校舎 (2002.3.28-30) p.228 No.246  
八木陽介、Kumar Vijay、Tina Marie Briere、Marcel Sluiter、西松毅、  
川添良幸
12. 全電子混合基底法による Si2p level と Si/SiO<sub>2</sub> 界面構造の関係性…………… 745  
日本物理学会講演概要集 第 57 回 年次大会  
立命館大学びわこ・くさつキャンパス (2002.3.24-27) p.843 No.25pPSB-34  
森里嗣生、大野かおる、川添良幸、宮田正靖、佐藤讓、上原正光
13. ポテンシャル繰り込みを考慮した格子モデルによる CuAu 系計算状態図・ 746  
日本金属学会講演概要 第 130 回 春期大会  
東京理科大学神楽坂校舎 (2002.3.28-30) p.223 No.230  
佐原亮二、水関博志、M.H.F. Sluiter、大野かおる、川添良幸、久保紘
14. プラズマイオン照射によるセシウム内包単層カーボンナノチューブの  
形成…………… 747  
第49回 応用物理学関係連合講演会 講演予稿集  
東海大学 (2002.3.27-30) p.165 No.30a-E-I  
鄭求桓、A. A. Farajian、平田孝道、畠山力三、田路和幸、川添良幸

15. PNX 分子により分子整流器シミュレーション研究..... 748  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.16  
新村健二、水関博志、Chiranjib Majumder、川添良幸
16. 高水素吸蔵クラスター $Al_nH_{3n}$ の構造と安定性..... 749  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.17  
川村博昭、V.Kumar、孫強、川添良幸
17. 分子デバイス用シクロデキストリン-ポリチオフェン包摂化合物  
分子絶縁被覆導線の構造と電子状態..... 750  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.18  
佐藤博之、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
18. 第一原理計算を用いたフラーレンを含む分子太陽電池の研究..... 751  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.39  
五十嵐伸昭、水関博志、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、  
川添良幸
19. 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..... 752  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.33  
多井豊、村上純一、C. Majumder、V. Kumar、水関博志、川添良幸
20. 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..... 753  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.39  
水関博志、五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、  
川添良幸
21. Prediction of the Thinnest  $SiO_2$  Nano Wire by  
First-principles..... 754  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.57  
Q. Sun, Q. Wang and Y. Kawazoe

22. Geometries and Magnetic Properties of Manganese Clusters..... 755  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.63  
T. M. Briere, M. H. F. Sluiter, V. Kumar and Y. Kawazoe
23. Magnetism in Clusters of Non-magnetic Elements, Pd, Rh, and Ru..... 756  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.64  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
24.  $Al_nH_{3n}$  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症..... 757  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.71  
川村博昭、V. Kumar、孫強、川添良幸
25. Ni クラスターの気相成長シミュレーション研究..... 758  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.72  
本郷研太、水関博志、川添良幸
26. 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..... 759  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.73  
Chiranjib Majumdar、水関博志、川添良幸
27. First-principles Study of the Endohedral Boron Nitride  $La@B_{36}N_{36}$   
Metallofullerence..... 760  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.74  
Q. Wang and Y. Kawazoe

28. 3d 遷移金属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…………… 761  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.78  
八木陽介、Vijay Kumar、Tina M. Briere、川添良幸
29. 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…………… 762  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.79  
佐藤博之、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
30. PNX 分子による分子整流器シミュレーション研究…………… 763  
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会  
第2回つくば地区合同フォーラム合同シンポジウム 講演予稿集  
筑波大学 (2002.5.15-17) p.80  
新村健二、水関博志、Chiranjib Majumder、川添良幸
31. 梯子格子系モット絶縁体の共鳴 2-マグノンラマン散乱…………… 764  
日本物理学会講演概要集 第 57 回 年次大会  
立命館大学びわこ・くさつキャンパス (2002.3.24-27) p.594 No.27pYH-9  
小野寺敬祥、筒井健二、遠山貴己、前川禎通
32. 三層系高温超伝導対中における 2 種類の超伝導振幅…………… 765  
日本物理学会講演概要集 第 57 回 年次大会  
立命館大学びわこ・くさつキャンパス (2002.3.24-27) p.500 No.24aYH-7  
森道康、遠山貴己、前川禎通
33. 二次元モット絶縁体における非線形光学応答の偏光依存性…………… 766  
日本物理学会講演概要集 第 57 回 年次大会  
立命館大学びわこ・くさつキャンパス (2002.3.24-27) p.673 No.24pYD-16  
高橋亮、遠山貴己、前川禎通

34. 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…… 767  
日本物理学会講演概要集 第 57 回 年次大会  
立命館大学びわこ・くさつキャンパス (2002.3.24-27) p.393 No.25aYL-2  
山下太郎、今村裕志、高橋三郎、前川禎通
35. 多層系高温超伝導体における異なる振幅の超伝導ギャップ…… 768  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.1  
森道康、遠山貴己、前川禎通
36. 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…… 769  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.2  
山下太郎、今村裕志、高橋三郎、前川禎通
37. 二次元モット絶縁体における非線形光学応答の偏光依存症…… 770  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.3  
高橋亮、遠山貴己、前川禎通
38. 強相関電子系におけるフォノン・スペクトルの数値計算…… 771  
金属材料研究所第 103 回講演会 春季講演会 (2002.5.23-24) p.4  
筒井健二、遠山貴己、前川禎通

## 講演

1. Ni<sub>6</sub>クラスターの反応過程の第一原理分子動力学計算  
物質設計と反応制御の分子物理化学 第5回公開シンポジウム  
京都大学化学研究所 (2001.6.21-23)  
志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸
2. 全電子混合基底法: 第一原理計算の新しいプラットフォーム  
物質設計と反応制御の分子物理化学 最終公開シンポジウム  
東京大学弥生講堂 (2002.1.21-23)  
大野かおる、Marcel Sluiter、川添良幸

## 研究会等

1. 『ACCMS-1 (1st Asian Consortium for Computational Materials Science )』  
Bangalore, India (2001.11.29-12.1)  
本センター共催

## VI. 新聞記事等

1. 『Simulation Uses Silicon in Fullerene』…………… 773  
The Nikkei Weekly (2001.8.27)
2. 『世界を驚かせた「シリコンフラーレン」の発見』…………… 774  
半導体産業新聞 (2001.10.10)
3. 『みらい紀行とうほく  
-カーボンナノチューブへの原子挿入シミュレーション-』…………… 775  
日刊工業新聞 (2001.11.21)
4. 『ナノテクで新産業革命 先端研究室の挑戦  
-分子回路の世界/スパコン使い模擬設計-』…………… 776  
日刊工業新聞 (2002.2.14)
5. 『「ホヤ」ゲノムなどで政策フォーラム開く』…………… 777  
日刊工業新聞 (2002.2.19)
6. 『シリコンでフラーレン-新しい半導体素子への期待-』…………… 778  
朝日新聞 (2002.3.16)
7. 『コンピュータが発見したシリコンフラーレン』…………… 779  
ナノテクが日本を救う (2002.4.19)
8. 『Materials Design by Simulation』…………… 783  
AOARD News Letter (2002)
9. 第 101 回 東北大学金属材料研究所 講演会 ポスター…………… 785  
(2001.5.24-25)
10. 第 102 回 東北大学金属材料研究所 講演会 ポスター…………… 786  
(2001.11.29-30)

## VII. 雑誌等掲載解説記事

1. 『私の自慢＝人間 -金研のメンバー＝友達-』…………… 787  
 研友 第58号 (2000-2001) pp.41-42  
 川添良幸
2. 『全電子第一原理計算プログラムの並列とその原子吸着シリコン表面の  
 再構成に関する大規模シミュレーションへの適用』…………… 789  
 CCSENews Vol.18 (2001.9) p.4  
 川添良幸
3. 『新スーパーコンピューター本格運用を開始』…………… 790  
 KINKEN Vol.36 (2001.10) p.5  
 川添良幸
4. 『総合ネットワーク運用室の現状』…………… 791  
 KINKEN Vol.36 (2001.10) p.7  
 川添良幸
5. 『シリコンフラーレンとその展開』…………… 792  
 M&E (国際技術情報誌) (2002.2) pp.110-114  
 川添良幸、Kumar Vijay、孫 強、王 前
6. 『シリコンフラーレンの発見とその応用-期待される  
 分子エレクトロニクスを展開-』…………… 797  
 ナノテクノロジー・材料計画総覧 (2002.2) pp.25-28  
 川添良幸
7. 『ダイオード等』…………… 801  
 カーボンナノチューブ-進む材料開発技術と今後の用途展開-  
 情報機構 (2002.4.) pp.199-201  
 川添良幸



## VIII. 書籍

1. *Ab Initio* Computer Simulations on Microclusters: Structures and Electronic Properties..... 804  
Cluster and Nanomaterials, Springer, (2001) pp.9-88  
Vijay Kumar, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
2. Cluster Investigations in Cyclodextrin Inclusion Compounds: Theory and Experiment..... 884  
Clusters and Nanomaterials, Springer, (2001) pp.109-131  
Rodion Vladimirovich Belosludov, Takehisa Yoshinari, Tohru Hiwada, Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno and Shinichiro Nagasaka
3. The Nanostructure of C<sub>60</sub> Photopolymers..... 907  
Clusters and Nanomaterials, Springer, (2001) pp.135-169  
Jun Onoe, Tomonobu Nakayama, Aiko Nakao, Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Masakazu Aono and Kazuo Takeuchi
4. Formation of Foreign-Atom-Doped Fullerenes..... 942  
Clusters and Nanomaterials, Springer, (2001) pp.171-186  
Tsutomu Ohtsuki and Kaoru Ohno
5. Electronic, Transport and Mechanical Properties of Carbon Nanotubes... 958  
Cluster and Natnomaterials, Springer, (2001) pp.187-220  
Keivan Esfarjani, Amir Abbas Farajian, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
6. 『Computational Materials Science -From *Ab Initio* to Monte Carlo Methods-』  
Springer, (1999.4)  
K. Ohno, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
7. 『Materials Science in Static High Magnetic Fields』  
Springer, (2001.8)  
Yoshiyuki Kawazoe (Chief Editor)

## IX. 表彰・授与

### 1. 表彰論文タイトル:

『Studies on Recovery Technique of Cementitious Materials  
by Freeze-Drying Method』

The ken Francis Award 賞 (2001.8.27-28)

Jing-Zhi Yu, Yoshiyuki Kawazoe

### 2. Aida-Kawazoe prize 創設

ACCMS (Asian Consortium on Computational Materials Science)

第一回は、インド国バンガロール市で開催

Hem Chandra Kandapal (Indian Institute of Science, Bangalore)、

Raghani Pushpa (JN Centre for Advanced Scientific Research, Bangalore)

Vaitheeswaran G and Kanchana V. (Anna University, Chennai)、

Naoki Watanabe (University of Tokyo, Tokyo) の4名に授与。

## 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・・・・・・・・ 993
2. 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・・ 994
3. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・ 997
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・・・・・ 998