

2003 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

(2003 年 4 月～2004 年 3 月)

目次

巻頭言

I. 研究内容概要

1. Ab initio Studies of Atomic and Electronic Structures and Vibrational Properties of Caged Clusters of Silicon Stabilized by Metal or Hydrogen Atoms..... 1
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, H. Kawamura, Tina M. Briere, Abhishek K. Singh and Yoshiyuki Kawazoe
COE Lab., IMRAM, Tohoku University F. Pichierri
2. A Lead-Free High-Tc Ferroelectric BaTi₂O₅..... 7
IMR, Tohoku University Marcel H. F. Sluiter, Teiichi Kimura, Takashi Goto and Yoshiyuki Kawazoe
Theoretical Sciences Unit, J. Nehru Centre for Advanced Scientific Research, Bangalore, India Umesh Waghmare
3. 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IV..... 12
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, 菊地良幸, 馬場英年, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Olga V. Pupysheva, Jian-Tao Wang, Hao Chen, 川添良幸
4. Si(313)12x1 再構成表面原子構造の第一原理計算..... 15
東北大学金属材料研究所 高橋まさえ, Vijay Kumar, 川添良幸, Weisheng Yang, 櫻井利夫

5. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる状態図計算…………… 19
東北大学大学院工学研究科 佐原亮二
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
関東職業能力開発大学 久保 紘

6. All-Electron *ab initio* Study of MgO Clusters with Tohoku University
Mixed-Basis Program TOMBO…………… 21
IMR, Tohoku University Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and
Yoshiyuki Kawazoe

7. Theoretical Study of Different Molecular Structures: Application for
Nanoelectronics…………… 24
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, A. A. Farajian,
Y. Kikuchi, H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe

8. Study on Localization of Vibration near Mechanical Stability Boundary to
Define Collapse Mechanism…………… 27
Institute of Inorganic Chemistry, Novosibirsk, Russia V. R. Belosludov,
T. M. Inerbaev, Oleg S. Subbotin
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

9. Electronic Transport Properties of a Metal-Semiconductor Carbon Nanotube
Heterojunction…………… 29
IMR, Tohoku University A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

10. Transition between N- and Z-Shaped Current-Voltage Characteristics in
Semiconductor Multiple-Quantum-Well Structure…………… 31
IMR, Tohoku University Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
Dep. of Low Temperature Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov
Moscow State University, Moscow, Russia Alexey V. Dmitriev

11. Electronic and Magnetic Studies of Double Impurities Doped TiO₂ —
First-Principles Calculations…………… 32
IMR, Tohoku University P. Murugan, R. V. Belosludov, H. Mizuseki,
T. Nishimatsu, T. Fukumura, M. Kawasaki and Y. Kawazoe

12. Piezo-Magnetic Nanotubes of Germanium..... 36
 IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and
 Yoshiyuki Kawazoe
13. 量子モンテカルロ法による第一原理計算手法の研究..... 39
 物質・材料研究機構 前園 涼
 東北大学金属材料研究所 本郷研太、安原 洋、川添良幸
14. First-principles Studies on Structure and Properties of Nanoclusters..... 42
 Virginia Commonwealth University, USA Q. Sun, Q. Wang
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
15. First-principles Studies on Structure and Properties of Nano Cages..... 43
 Virginia Commonwealth University, USA Q. Wang
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
16. Chemical Functionalization of Si₂₀H₂₀..... 44
 COE Lab., IMRAM, Tohoku University Fabio Pichierri
 IMR, Tohoku University Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
17. Unsteady Convection in Czochralski Growth..... 48
 IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe
 Dep. of Engineering Mechanics, Chongqing University,
 Chongqing, China Jingqiu Chen
 IMRAM, Tohoku University Tsuguo Fukuda
18. 新しい分子およびクラスターの電子励起状態の第一原理計算..... 50
 横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、武田 淳
 東北大学金属材料研究所 石井 聡、川添良幸
 東北大学学際科学高等研究センター 粕谷厚生
 米バージニア・コモンウェルス大学 森里嗣生
 山形大学理学部物理 長坂慎一郎、高橋良雄、吉成武久

19. 全電子混合基底法と第一原理分子動力学シミュレーション..... 53
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 石井 聡、Marcel Sluiter、川添良幸
米バージニア・コモンウェルス大学 森里嗣生
東北大学大学院理学研究科附属原子核理学研究施設 大槻 勤
20. Transition Metal-Silicon Sub-nano Clusters and Interaction of Transition Metal Elements with the Si(001) Surface..... 54
School of Mathematical & Physical Science,
The University of Newcastle, Australia M. W. Radny
IMR, Tohoku University T. M. Briere, V. Kumar and Y. Kawazoe
21. 第一原理 GW 近似によるベンゼン分子の準粒子エネルギー計算..... 56
東北大学金属材料研究所 石井 聡、川添良幸
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる
22. Ab initio Molecular Dynamics Study of Cs-ion Insertion and Adsorption at Cap and Stem of Carbon Nanotubes..... 58
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
23. ペロブスカイト型強誘電体全エネルギー表面の第一原理計算とその比較・ 61
NECトーキン株式会社 橋本孝俊、佐々木淳、池田義秋
東北大学金属材料研究所 西松 毅、水関博志、川添良幸
24. 第一原理計算による貴金属クラスターの系統的大規模研究..... 63
東北大学金属材料研究所 伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
25. 金属ポルフィリンオリゴマーの導電率の理論的解析..... 66
東北大学金属材料研究所 菊地良幸、水関博志、
Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、川添良幸
26. ペロブスカイト型酸化物による希薄磁性半導体の設計..... 71
東北大学金属材料研究所 北村周平、西松 毅、水関博志、
安原 洋、川添良幸、川崎 雅司

27. 新たな有機イオン結晶 DAST 誘導体の計算設計..... 74
東北大学金属材料研究所 斎藤繁喜、水関博志、高橋まさえ、
五十嵐伸昭、Shang-Ying Wang、Rodion V. Belosludov、安原 洋、
川添良幸
28. セメントの水和反応生成物の形成過程に関する数値シミュレーション..... 77
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 Abhishek Kumar Singh、Tina M. Briere、
余 京智、川添良幸
29. ロジウムクラスターの構造最適化と磁性..... 78
株式会社 コーデック 斐栄造、長内弘喜
東北大学金属材料研究所 Vijay Kumar、川添良幸
30. Transport Through Heterocyclic Molecule: *Ab initio* Molecular Orbital
Theory..... 80
Physics Dep., Fudan University, China W. W. Cheng, Y. X. Liao and
H. Chen
IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
31. Fluid Dynamical Simulation of Star Polymers..... 84
CIR, Tohoku University Kazuhito Shida
Osaka University Yo Nakamura
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
32. 第一原理計算による Mn_5 , Mn_6 クラスターにおける Stern-Gerlach スペクトルの
研究..... 85
Virginia Commonwealth University 森里嗣生, N. O. Jones,
S. N. Khanna
東北大学金属材料研究所 川添良幸

33. Electronic Transport Mechanism of a Molecular Electronic Device : Structural Effects and Terminal Atoms..... 87
Center for Advanced Study, Tsinghua University, China J. Q. Lu,
J. Wu and Bing-Lin Gu
Dep. of Physics, Tsinghua University, China Wenhui Duan
Physics Dep., Fudan University, China H. Chen
IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
34. 生体高分子の構造と機能 : 新材料への応用に向けて..... 88
弘前大学理工学部 種田晃人
東北大学金属材料研究所 川添良幸
35. 大規模第一原理計算手法の開発と強誘電体の物性予測..... 89
広島大学大学院 先端物質科学研究科 小口多美夫、獅子堂達也、
石井史之
東北大学金属材料研究所 川添良幸
36. ジルコニウム水素化物の熱伝導度における水素の役割..... 91
東北大学金属材料研究所 小無健司、川添良幸、松井秀樹
産業技術総合研究所 計算科学研究部門 池庄司民夫
37. 厳密対角化法による t - J 模型の励起スペクトルの研究..... 96
東北大学金属材料研究所 遠山貴己、前川禎通
38. $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ における共鳴非弾性 X 線散乱の理論..... 97
東北大学大学院 理学研究科物理学専攻 石原純夫
39. Crossed Andreev Reflection in a d-wave Superconductor with Two Quantum Point Contacts..... 98
IMR, Tohoku University S. Takahashi
40. 一次元 Mott 絶縁体における光励起状態の動的 DMRG 法による研究..... 99
東北大学金属材料研究所 松枝宏明, 遠山貴己, 前川禎通

41. 銅酸化物絶縁体における銅L吸収端共鳴非弾性X線散乱の波数依存性..... 103
 東北大学金属材料研究所 筒井健二、山本逸人、遠山貴己、前川禎通
42. 密度行列繰り込み群法による CuO 鎖の電荷密度波に関する研究..... 104
 東北大学金属材料研究所 森 道康, 遠山貴己, 前川禎通, Jose A. Riera
43. モット絶縁体の光励起状態と光吸収スペクトルの温度変化..... 106
 東北大学金属材料研究所 小野寺啓祥, 遠山貴己, 前川禎通
44. 2つの強磁性体電極が接合した超伝導体における交差アンドレーエフ反射の理論的研究..... 107
 東北大学金属材料研究所 山下太郎、高橋三郎、前川禎通
45. 転位とボイドの相互作用の計算機シミュレーション..... 110
 東北大学金属材料研究所 佐藤裕樹、二田伸康、松井秀樹
46. SiGe 高指数表面構造のモデリング..... 112
 東北大学金属材料研究所 藤川安仁
47. 酸化物融液対流の3次元非定常数値シミュレーション..... 113
 東北大学多元物質科学研究所 敬 成君、小林正樹、塚田隆夫、宝沢光紀
 早稲田大学各務記念材料技術研究所 島村清史、一ノ瀬昇
 九州大学先導物質化学研究所 今石宣之
 東北大学金属材料研究所 宍戸統悦
48. Spin-Dependent Single-Electron-Tunneling The Role of Spin-Accumulation..... 118
 IMR, Tohoku University Franck Ernult, Kei Yakushiji, Seiji Mitani and Koki Takanashi
49. 量子化学計算による金属内包フラーレン $\text{La}_2@C_{80}$ の分子構造およびラマンスペクトルの研究..... 123
 東北大学金属材料研究所 ; JST・CREST 下谷秀和、岩佐義宏

50. Self-Energy Correction to Momentum Density Distribution..... 126
IMR, Tohoku University Z. Tang, Y. Nagai, K. Inoue and
M. Hasegawa
51. 第一原理計算によるセラミックスと遷移金属との接合に関する研究..... 128
東北大学大学院 工学研究科 佐藤 学、阿部勝憲
東北大学金属材料研究所 長谷川雅幸
52. 酸化物超伝導線材のフラックスフロー状態における熱的安定性..... 131
東北大学金属材料研究所 西島 元、淡路 智、渡辺和雄
53. 超伝導微細系の数値シミュレーション..... 134
大阪府立大学大学院 工学研究科 加藤 勝
日本原子力研究所 計算科学推進センター 町田昌彦
東北大学金属材料研究所 小山富男

II. 原著論文

<2001 年>

1. 重ね合わせ変形による標準脳断面画像作成..... 139
A Method for Generating the Standard Brain Image of Transversal
Sectional View Using Image Registration (in Japanese)
電気学会論文誌 C 121 巻 10 号(2001.10) pp.1593-1598
三浦直樹, 渡部彰一郎, 志田和人, 福田 寛, 川添良幸, 清水俊夫

<2002 年>

1. Theoretical Calculations on Transition Metal Materials: From *ab initio* to
Tight-binding Results..... 145
Recent Res. Devel. Physics, 3 (2002) pp.727-755
Lei Zhou, Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
2. Absolute Stability Boundaries of Clathrate Hydrates of Cubic Structure II • 174
J. Supramolecular Chemistry, 2 (2002) pp.377-383
Vladimir R. Belosludov, Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov,
Jun-ichi Kudoh and Yoshiyuki Kawazoe
3. Thermal Expansion and Lattice Distortion of Clathrate Hydrates of Cubic
Structures I and II 181
J. Supramolecular Chemistry, 2 (2002) pp.453-458
Vladimir R. Belosludov, Talgat M. Inerbaev, Oleg S. Subbotin,
Rodion V. Belosludov, Jun-ichi Kudoh and Yoshiyuki Kawazoe

<2003 年>

1. Thiophene Thiol on the Au(111) Surface: Size-Dependent Adsorption
Study..... 187
J. Chem. Phys., 118 [21] (2003) pp.9809-9813
Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

2. Electronic Transport Through Benzene Molecule: Effect of Gold
Contacts..... 192
Physica E, 18 (2003) pp.253-254
Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and
Yoshiyuki Kawazoe

3. Theoretical Study of Phthalocyanine-Fullerene Complex for a High Efficiency
Photovoltaic Device Using *ab initio* Electronic Structure Calculation..... 194
Synthetic Metals, 138 (2003) pp.281-283
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

4. Stability of Sb Line Structures on Si(001) 197
Phys. Rev. B, 67 [19] (2003) pp.1933071-1933074
Jian-Tao Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe,
Tomihiko Hashizume, Masamichi Naitoh, Ding-Sheng Wang and
En-Ge Wang

5. Encapsulation of Cesium Inside Single-Walled Carbon Nanotubes by
Plasma-ion Irradiation Method..... 201
Thin Solid Films, 435 (2003) pp.307-311
Goo-Hwan Jeong, A. A. Farajian, Takamichi Hirata, Rikizo Hatakeyama,
Kazuyuki Tohji, T. M. Briere, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

6. Electronic Transport Through Bent Carbon Nanotubes: Nanoelectromechanical
Sensors and Switches..... 206
Phys. Rev. B, 67 [20] (2003) pp.2054231-2054236
Amir A. Farajian, Boris I. Yakobson, Hiroshi Mizuseki and
Yoshiyuki Kawazoe

7. Site Occupation in the Ni-Nb μ Phase..... 212
Phys. Rev. B, 67 [17] (2003) pp.17420301-17420310
Marcel H. F. Sluiter, Alain Pasturel and Yoshiyuki Kawazoe

8. Molecular Enamel Wires for Electronic Devices: Theoretical Study..... 222
 Jpn. J. Appl. Phys., 42 [4B] (2003) pp.2492-2494
 Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian,
 Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe

9. Cyclic and Linear Polymeric Structures of Al_nH_{3n} ($n = 3-7$) Molecules..... 225
 Phys. Rev. A, 67 [6] (2003) pp.0632051-0632058
 Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe

10. Hardness and Oxidation Resistance of Perovskite-type Solid Solution of
 the $ScRh_3B$ - $ScRh_3C$ System..... 233
 Jpn. J. Appl. Phys., 42 [8] (2003) pp.5213-5214
 Toetsu Shishido, Jinhua Ye, Kunio Kudou, Shigeru Okada,
 Kiyokata Iizumi, Masaoki Oku, Yoshio Ishizawa, Akira Yoshikawa,
 Masahiko Tanaka, Shuji Oishi, Naoki Kamegashira, Shigemi Kohiki,
 Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima

11. *Ab Initio* Study of Divalent *3d* Transition Metal Impurities in $KMgF_3$ and
 $BaLiF_3$ 235
 Jpn. J. Appl. Phys., 42 [8] (2003) pp.5082-5085
 Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki,
 Yoshiyuki Kawazoe, Dorota A. Pawlak, Kiyoshi Shimamura,
 Noboru Ichinose and Tsuguo Fukuda

12. Theoretical Study of Insulated Wires Based on Polymer Chains Encapsulated in
 Molecular Nanotubes..... 239
 Thin Solid Films, 438-439 (2003) pp.80-84
 Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

13. Theoretical Study of Donor-spacer-acceptor Structure Molecule for Use as
 Stable Molecular Rectifier: Geometric and Electronic Structures..... 244
 Thin Solid Films, 438-439 (2003) pp.235-237
 H. Mizuseki, N. Igarashi, C. Majumder, R. V. Belosludov,
 A. A. Farajian and Y. Kawazoe

14. Polaron in a One-dimensional C_{60} Crystal..... 247
 Phys. Rev. B, 67 [15] (2003) pp.1554101-1554108
 V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

15. *Ab initio*-Monte Carlo Studies on Magnetic Properties of Tetragonal
 $L1_0$ Ordered 3d/Au Superlattices..... 255
 Mat. Trans. JIM, 44 [8] (2003) pp.1529-1534
 Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

16. Comparison of Electronic Structures of $ScAl_3$ and $ScRh_3$: X-ray Photoelectron
 Spectroscopy and *Ab Initio* Band Calculation..... 261
 J. Alloys Compd., 358 (2003) pp.264-267
 Masaoki Oku, Toetsu Shishido, Qiang Sun, Kazuo Nakajima,
 Yoshiyuki Kawazoe and Kazuaki Wagatsuma

17. Critical Size of the Phase Transition from Cubic to Tetragonal in Pure Zirconia
 Nanoparticles..... 265
 Nano Letters, 3 [7] (2003) pp.871-875
 S. Tsunekawa, S. Ito, Y. Kawazoe and J.-T. Wang

18. Magnetism in Clusters of Non-Magnetic Elements: Pd, Rh, and Ru..... 270
 Eur. Phys. J. D, 24 (2003) pp.81-84
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

19. Novel Metal-Encapsulated Caged Clusters of Silicon and Germanium..... 274
 Eur. Phys. J. D, 24 (2003) pp.227-232
 Vijay Kumar

20. Nitrogen-Induced Magnetic Transition in Small Chromium Clusters..... 280
 J. Chem. Phys., 119 [14] (2003) pp.7124-7130
 Q. Wang, Q. Sun, B. K. Rao, P. Jena and Y. Kawazoe

21. Magnetism in Transition-Metal-Doped Silicon Nanotubes..... 287
 Phys. Rev. Lett., 91 [14] (2003) pp.1468021-1468024
 Abhishek Kumar Singh, Tina M. Briere, Vijay Kumar and
 Yoshiyuki Kawazoe

22. Band Structure Calculation of TTTA Crystal..... 291
 Trans. Mat. Res. Soc. Jpn., 28 [3] (2003) pp.911-914
 Miou Furuya, Kaoru Ohno, Tsuguo Morisato, Yoshiyuki Kawazoe
 and Jun Takeda
23. Na Adsorption on the Si(111)-(7×7) Surface: From Two-Dimensional Gas to
 Nanocluster Array..... 295
 Phys. Rev. Lett., 91 [12] (2003) pp.1261011-1261014
 Kehui Wu, Y. Fujikawa, T. Nagao, Y. Hasegawa, K. S. Nakayama,
 Q. K. Xue, E. G. Wang, T. Briere, V. Kumar, Y. Kawazoe, S. B. Zhang
 and T. Sakurai
24. Blueshifts in the Ultraviolet Absorption Spectra of Cerium Oxide
 Nanocrystallites..... 299
 J. Appl. Phys., 94 [5] (2003) pp.3654-3656
 Shin Tsunekawa, Jian-Tao Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Atsuo Kasuya
25. Cluster Expansion Method for Adsorption: Application to Hydrogen
 Chemisorption on Graphene..... 302
 Phys. Rev. B, 68 (2003) pp.854101-854107
 Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
26. High-Temperature Solution Growth and Characterization of Chromium
 Disilicide..... 309
 Jpn. J. Appl. Phys., 42 (2003) pp.7292-7293
 Toetsu Shishido, Shigeru Okada, Yoshio Ishizawa, Kunio Kudou,
 Kiyokata Iizumi, Yutaka Sawada, Hiroyuki Horiuchi, Katsuhiko Inaba,
 Takashi Sekiguchi, Jinhua Ye, Satoru Miyashita, Akiko Nomura,
 Takamasa Sugawara, Kazuo Obara, Yoshihiro Murakami, Kozo Fujiwara,
 Toru Ujihara, Gen Sazaki, Noritaka Usami, Masaoki Oku,
 Yoshihiko Yokoyama, Shigemi Kohiki, Yoshiyuki Kawazoe and
 Kazuo Nakajima
27. Metal-Doped Magic Clusters of Si, Ge, and Sn: The Finding of a Magnetic
 Superatom..... 311
 Appl. Phys. Lett., 83 [13] pp.2677-2679
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

28. Geometry and Energetics of Si₆₀ Isomers..... 314
 Science and Technology of Advanced Materials, 4 (2003) pp.361-365
 Q. Sun, Q. Wang, P. Jena, J. Z. Yu and Y. Kawazoe
29. First-principles Study of La-B₃₆N₃₆ Cage..... 319
 Physica B, 339 (2003) pp.105-109
 Q. Wang, Q. Sun, T. Oku and Y. Kawazoe
30. Molecular Orbital Analysis of Frontier Orbitals for Molecular Electronics:
 a Case Study of Unimolecular Rectifier and Photovoltaic Cell..... 324
 Science and Technology of Advanced Materials, 4 (2003) pp.377-382
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
 Nobuaki Igarashi, Jian-Tao Wang, Hao Chen, Chiranjib Majumder,
 Shigeyuki Miura and Yoshiyuki Kawazoe
31. Genetic Algorithm Approach to Aromatic Molecules for Nanoscale
 Device..... 330
 Materials Science and Engineering, C23 (2003) pp.807-809
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
32. Search for Perovskite-Type New Boride in the Sc-Ni-B System..... 333
 Jpn. J. Appl. Phys., 42 [12] (2003) pp.7464-7466
 Toetsu Shishido, Kunio Kudou, Takahiko Sasaki, Shigeru Okada,
 Jinhua Ye, Kiyokata Iizumi, Akiko Nomura, Takamasa Sugawara,
 Kazuo Obara, Masahiko Tanaka, Shigemi Kohiki, Yoshiyuki Kawazoe,
 Kazuo Nakajima and Masaoki Oku
33. Breakdown of Time-Reversal Symmetry of Photoemission and its Inverse in
 Small Silicon Clusters..... 336
 Phys. Rev. B, 68 [19] (2003) pp.1954121-1954125
 Soh Ishii, Kaoru Ohno, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

34. Theoretical Study of Molecular Enamel Wires Based on Polythiophene-Cyclodextrin Inclusion Complexes..... 341
Mol. Cryst. Liq. Cryst., 406 (2003) pp.195-204
Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
35. Theoretical Study of Donor-Spacer-Acceptor Structure Molecule for Stable Molecular Rectifier..... 351
Mol. Cryst. Lip. Cryst., 406 (2003) pp.205-211
H. Mizuseki, K. Niimura, C. Majumder, R. V. Belosludov, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
36. Prediction of XPS Spectra of Silicon Self-Interstitials with the All-Electron Mixed-Basis Method..... 358
Physica B, 340-342 (2003) pp. 570-574
Takeshi Nishimatsu, Marcel Sluiter, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Yuzuru Sato, Masayasu Miyata and Masamitsu Uehara
37. Local Strain Relaxation in Czochralski-Grown GeSi Bulk Alloys..... 363
Physica B, 340-342 (2003) pp.854-857
I. Yonenaga, M. Sakurai, M. Nonaka, T. Ayuzawa, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe
38. Large Magnetovolume Effects and Band Structure of Itinerant-Electron Metamagnetic $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$ Compounds..... 367
Phys. Rev. B, 68 (2003) pp.1044311-1044316
A. Fujita, K. Fukamichi, J.-T. Wang and Y. Kawazoe
39. Computational Materials Science : The Emergence of Predictive Capabilities of Material Behaviour..... 373
Sadhana, 28 [3-4] (2003) pp.815-831
Vijay Kumar

40. Adsorption Isotherm and Other Properties of Methane in Zeolite A from an Intermolecular Potential Derived from *ab initio* Calculations..... 390
 J. Am. Chem. Soc., 125 (2003) pp.16192-16193
 Pradip Kr. Ghorai, Marcel Sluiter, Subramanian Yashonath and Yoshiyuki Kawazoe
41. First-Principles Studies of the Geometry and Energetics of the Si₃₆ Cluster..... 392
 Phys. Rev. A, 67 (2003) pp.632011-632016
 Q. Sun, Q. Wang, P. Jena, S. Waterman and Y. Kawazoe
42. Low-energy Surface Collision Induced Dissociation of Ge and Sn Cluster Ions..... 398
 Eur. Phys. J. D, 24 (2003) pp.295-298
 Y. Tai, J. Murakami, C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
43. A Molecular Dynamics Study of Thermal Conductivity of Zirconium Hydride..... 402,
 J. Alloys Compd., 356-357 (2003) pp.279-282
 Kenji Konashi, Tamio Ikeshoji, Yoshiyuki Kawazoe and Hideki Matsui
44. Cesium Encapsulation in Single-walled Carbon Nanotubes Via Plasma Ion Irradiation: Application to Junction Formation and *ab initio* Investigation • 406
 Phys. Rev. B, 68 (2003) pp.754101-754106
 G.-H. Jeong, A. A. Farajian, R. Hatakeyama, T. Hirata, T. Yaguchi, K. Tohji, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
45. *Ab initio* Calculations of Electronic Structures, Polarizabilities, Raman and Infrared Spectra, Optical Gaps, and Absorption Spectra of M@Si₁₆ (M=Ti and Zr) Clusters..... 412
 Phys. Rev. B, 68 (2003) pp.1554121-1554129
 Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe
46. Andreev Reflection in Ferromagnet/Superconductor/Ferromagnet Structures..... 421
 Physica E, 18 (2003) pp.52-53
 T. Yamashita, H. Imamura, S. Takahashi and S. Maekawa

47. Thermodynamic and Thermoelectric Properties of High-Temperature Cuprate Superconductors in the Stripe Phase..... 423
 Phys. Rev. B, 67 (2003) pp.1805021-1805024
 T. Tohyama, S. Maekawa and P. Prelovsek
48. Crossed Andreev Reflection in Structures Consisting of a Superconductor with Ferromagnetic Leads..... 427
 Phys. Rev. B, 68 (2003) pp.1745041-1745048
 Taro Yamashita, Saburo Takahashi and Sadamichi Maekawa
49. Effect of Wetting of Melt Against Die Surface on the Edge-Defined Film-Fed Growth of Oxide Crystals..... 435
 J. Cryst. Growth, 249 (2003) pp.230-239
 Masaki Kobayashi, Takao Tsukada and Mitsunori Hozawa
50. Effect of RF Coil Position on Spoke Pattern on Oxide Melt Surface in Czochralski Crystal Growth..... 445
 J. Cryst. Growth, 252 (2003) pp.550-559
 C. J. Jing, M. Kobayashi, T. Tsukada, M. Hozawa, T. Fukuda, N. Imaishi, K. Shimamura and N. Ichinose
51. Effect of Internal Radiative Heat Transfer on Spoke Pattern on Oxide Melt Surface in Czochralski Crystal Growth..... 455
 J. Cryst. Growth, 259 (2003) pp.367-373
 C. J. Jing, A. Hayashi, M. Kobayashi, T. Tsukada, M. Hozawa, N. Imaishi, K. Shimamura and N. Ichinose
52. Transport Characteristics of a CuNb/Nb₃Sn Superconducting Coil Fabricated Using a React and Wind Method..... 462
 Supercond. Sci. Technol., 16 (2003) pp.1082-1085
 Gen Nishijima, Satoshi Awaji, Kazuo Watanabe, Kazutomi Miyoshi and Akio Kimura
53. Thermal Stability of Oxide Superconductors in Flux Flow State..... 466
 IEEE. Trans. Appl. Supercond., 13 [2] (2003) pp.1576-1579
 Gen Nishijima, Satoshi Awaji and Kazuo Watanabe

54. Stable and Controlled Amphoteric Doping by Encapsulation of Organic Molecules Inside Carbon Nanotubes..... 470
 Nature Materials, 2 [10] (2003) pp.683-688
 Taishi Takenobu, Takumi Takano, Masashi Shiraishi,
 Yousuke Murakami, Masafumi Ata, Hiromichi Kataura,
 Yohji Achiba and Yoshihiro Iwasa

<2004 年>

1. Exohedral Functionalization of the Icosahedral Cluster $\text{Si}_{20}\text{H}_{20}$:
 a Density Functional Theory
 Study..... 476
 Chem. Phys. Lett., 383 (2004) pp.544-548
 Fabio Pichierri, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
2. Metal Encapsulated Nanotubes of Silicon and Germanium..... 481
 J. Mater. Chem., 14 (2004) pp.555-563
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. Effect of Sequential Oxidation on the Electronic Structure of
 Tungsten Clusters..... 490
 Chem. Phys. Lett., 387 (2004) pp.29-34
 Q. Sun, B. K. Rao, P. Jena, D. Stolcic, G. GantefÖr and Y. Kawazoe
4. Effect of Boron Non-Stoichiometry on B-Site in Perovskite Type Structure
 ScB_xRh_3 and CeB_xRh_3 on Charges of Atoms on A-Site: Study by X-ray
 Photoelectron and Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopies..... 496
 J. Solid State Chem., 177 (2004) pp.457-460
 Masaoki Oku, Toetsu Shishido, Takeshi Shinohara, Qiang Sun,
 Yoshiyuki Kawazoe, Kazuo Nakajima and Kazuaki Wagatsuma
5. Stable Geometries and Magnetic Properties of Single-Walled Carbon
 Nanotubes Doped with *3d* Transition Metals: A First-Principles
 Study..... 500
 Phys. Rev. B, 69 [7] (2004) pp.754141-754149
 Yosuke Yagi, Tina M. Briere, Marcel H. F. Sluiter, Vijay Kumar,
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

6. Ultra-Stable Nanoparticles of CdSe Revealed from Mass Spectrometry··· 509
 Nature Materials, 3 (2004) pp.99-102
 Atsuo Kasuya, Rajaratnam Sivamohan, Yurii A. Barnakov,
 Igor M. Dmitruk, Takashi Nirasawa, Volodymyr R. Romanyuk,
 Vijay Kumar, Sergiy V. Mamykin, Kazuyuki Tohji,
 Balachandran Jeyadevan, Kozo Shinoda, Toshiji Kudo, Osamu Terasaki,
 Zheng Liu, Rodion V. Belosludov, Vijayaraghavan Sundararajan and
 Yoshiyuki Kawazoe

7. Theoretical Study of Clathrate Hydrates with Multiple Occupation····· 513
 J. Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry, 48 (2004) pp.55-60
 Talgat M. Inerbaev, Vladimir R. Belosludov, Rodion V. Belosludov,
 Marcel Sluiter, Yoshiyuki Kawazoe and Jun-Ichi Kudoh

8. Aharonov-Bohm Effect in Higher Genus Materials····· 519
 Phys. Lett. A, 321 (2004) pp.369-375
 K. Sasaki, Y. Kawazoe and R. Saito

9. Local Atomic Structure in Czochralski-grown Ge_{1-x}Si_x Bulk Alloys····· 526
 Appl. Surf. Sci., 224 (2004) pp.193-196
 I. Yonenaga, M. Sakurai, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe

10. Hydrodynamic Factors for Linear and Star Polymers on Lattice under the Theta
 Condition····· 530
 Polymer, 45 (2004) pp.1729-1733
 Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Yo Nakamura

11. Electronic Transport Mechanism of a Molecular Electronic Device: Structural
 Effects and Terminal Atoms····· 535
 Phys. Lett. A, 323 (2004) pp.154-158
 Jun-Qiang Lu, Jian Wu, Hao Chen, Wenhui Duan, Bing-Lin Gu and
 Yoshiyuki Kawazoe

12. Soft Breakdown of an Insulating Nanowire in an Electric Field····· 540
 Nanotechnology, 15 (2004) pp.260-263
 Q. Sun, Q. Wang, Y. Kawazoe and P. Jena

13. Smallest Magic Caged Clusters of Si, Ge, Sn and Pb by Encapsulation of Transition Metal Atom..... 544
Nano Letters, 4 [4] (2004) pp.677-681
Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe

14. Interaction of Magic Gold Cluster with Si₆₀ Cage..... 549
Eur. Phys. J. D, 29 (2004) pp.231-234
Q. Sun, Q. Wang, Y. Kawazoe and P. Jena

15. Electronic Transport Properties of a Metal-Semiconductor Carbon Nanotube Heterojunction..... 553
Physica E, 22 (2004) pp.675-678
Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

16. Electron Transport in Molecular Enamel Wires..... 557
Jpn. J. Appl. Phys., 43 [4B] (2004) pp.2061-2063
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki,
Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe

17. Three-Dimensional Unsteady Convection in LiCaAlF₆-Czochralski Growth..... 560
J. Cryst. Growth, 266 (2004) pp.81-87
Zhong Zeng, Jingqiu Chen, Hiroshi Mizuseki, Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe

18. Friedel Oscillations in a Two-Band Hubbard Model for CuO Chains..... 567
Phys. Rev. B, 69 (2004) pp.145131-145137
M. Mori, T. Tohyama, S. Maekawa and J. A. Riera

19. Resonant Inelastic X-ray Scattering in Manganites with Perovskite Structure..... 574
Physica B, 345 (2004) pp.15-18
S. Ishihara, H. Kondoh and S. Maekawa

20. Quantum Chemical Study on the Configurations of Encapsulated Metal Ions and the Molecular Vibration Modes in Endohedral Dimetallofullerene $\text{La}_2@C_{80}$ 578
J. Am. Chem. Soc., 126 [1] (2004) pp.364-369
Hidekazu Shimotani, Takayoshi Ito, Yoshihiro Iwasa, Atsushi Taninaka, Hisanori Shinohara, Eiji Nishibori, Masaki Takata and Makoto Sakata
21. First-Principles Calculation of Positron Annihilation Characteristics in Solids: From Positron to Positronium 584
Mat. Sci. Forum, 445-446 (2004) pp.390-394
Z. Tang, M. Hasegawa, Y. Nagai and M. Saito

III. 国際会議発表論文

<2001 年>

1. Advanced Materials Design by Computer Simulation Based on the First Principles Calculations and Modelling..... 589
Proceedings of Asia Academic Seminar on New Materials : Supported by ARCI(India) and JSPS(Japan) (Invited talk)
Hyderabad, India (2001.12.12-21) pp.57-65
Yoshiyuki Kawazoe

<2003 年>

1. Structural Properties of Transition-Metal@Si_n (n=14-16) Atomic Clusters..... 598
27th Annual Condensed Matter and Materials Meeting
Wagga-Wagga, Australia (2003.2.4-7) p.76
M.W. Radny, V. Kumar and Y. Kawazoe
2. Theoretical Study of Donor-Spacer-Acceptor Structure Molecule for Stable Molecular Rectifier..... 599
NanoTech 2003 (2003 Nanotechnology Conference and Trade Show)
San Francisco, California, U.S.A., (2003.2.23-27), 2 We32-03
H. Mizuseki, K. Niimura, C. Majumder, R.V. Belosludov,
A. A. Farajian and Y. Kawazoe
3. An Organic Molecule - Fullerene Mixture for a High Efficiency Photovoltaic Device: A Theoretical Study..... 603
NanoTech 2003 (2003 Nanotechnology Conference and Trade Show)
San Francisco, California, U.S.A., (2003.2.23-27), 2 Mo71-03
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
4. Nano-sensors Based on Nanotubes: Deformed-nanotubes Transport..... 607
NanoTech 2003 (2003 Nanotechnology Conference and Trade Show)
San Francisco, California, U.S.A., (2003.2.23-27), 3 Tu56-07
A. A. Farajian, B. I. Yakobson, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

5. Effects of Gold Contacts on Transport through Benzene Molecule..... 610
 NanoTech 2003 (2003 Nanotechnology Conference and Trade Show)
 San Francisco, California, U.S.A., (2003.2.23-27), 2 Th23-02
 A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

6. Transport Through Mechanically Deformed Nanotubes..... 613
 The Electrochemical Society 203rd Meeting (ECS)
 Paris, France (2003.4.27-5.2)
 A. A. Farajian, B. I. Yakobson, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

7. Electronic Transport Through Benzene Molecule and DNA Base Pairs... 614
 The Electrochemical Society 203rd Meeting (ECS)
 Paris, France (2003.4.27-5.2)
 A. A. Farajian, T. M. Briere, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

8. Electronic Structure of Self-Localized Excitons in a One Dimensional
 C_{60} Crystal..... 615
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh

9. Theoretical Study of Clathrate Hydrates with Multiple Occupation..... 627
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, Marcel Sluiter,
 Y. Kawazoe and J. Kudoh

10. Dependency of Transport on Orientation of Amino Molecule Attached to
 Benzene..... 636
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 H. Chen, J. Q. Lu, J. Wu, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

11. Electronic Transport Through Benzene Molecule and DNA Base Pairs··· 641
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

12. *Ab initio* and Electromagnetic Field Combined Calculation····· 644
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Keisuke Fujisaki, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Mizuseki and Amit Jain

13. All-Electron *GW* Calculations for Small Clusters····· 650
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

14. Computer Simulation of Single Wall Carbon Nanotube Crystals····· 657
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Vijay Kumar, Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

15. Theoretical Study of Unimolecular Rectifying Function of a Donor-
 Spacer-Acceptor Structure Molecule····· 661
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing
 and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 H. Mizuseki, Y. Kikuchi, K. Niimura, C. Majumder, R. V. Belosludov,
 A. A. Farajian and Y. Kawazoe

16. *Ab initio* Molecular Dynamics Simulation of Foreign Atom Insertion into C₆₀..... 600
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Tsuguo Morisato, Soh Ishii, Marcel F. Sluiter, Yoshiyuki Kawazoe and Tsutomu Ohtsuki
17. Magnetic Properties of Doped Silicon Nanotube..... 670
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Abhishek K. Singh, Tina M. Briere, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
18. Formation of Radioactive Fullerenes by Using Nuclear Recoil..... 673
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Tsuguo Morisato, Soh Ishii, Marcel F. Sluiter, Hideyuki Yuki and Yoshiyuki Kawazoe
19. Cluster Expansion Method for Chemisorption Geometries..... 680
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
20. Realization of "Molecular Enamel Wire" Concept for Molecular Electronics..... 687
 Proceedings of the 4th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM'03)
 Sendai, Japan (2003.5.18-23)
 Rodion V. Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe

21. Genetic Algorithm Approach on Organic Molecules for Nanoscale Device..... 692
 The European Materials Research Society '03 (E-MRS)
 Strasbourg, France (2003.6.10-13) No.A/PI-14
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
22. Theoretical Study on Junction of Porphyrin Chain for Nanoscale Device..... 692
 The European Materials Research Society '03 (E-MRS)
 Strasbourg, France (2003.6.10-13) No.B/PI.15
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
 Amir A. Farajian, Chiranjib Majumder and Yoshiyuki Kawazoe
23. Theoretical Study on Junction of Metal Porphyrin Oligomer for Molecular Nanoelectronics..... 693
 The European Materials Research Society '03 (E-MRS)
 Strasbourg, France (2003.6.10-13) No.G/PI.03
 Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kikuchi, Rodion V. Belosludov,
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
24. Realization of "Molecular Enamel Wire" Concept for Molecular Electronics
 2003 TMS Electronic Materials Conference..... 694
 Salt Lake City, Utah, U.S.A. (2003.6.25-27) p.68 No.Y1
 Rodion Vladimirovich Belosludov, Hiroyuki Sato, Amir Abbas Farajian,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. Search for Perovskite-type New Borides in the Sc-TM-B (TM=Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) Systems..... 695
 14th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements
 Linz, Austria (2003.7.6-11)
 Toetsu Shishido, Shigeru Okada, Jinhua Ye, Takahiko Sasaki, Kunio Kudou,
 Kiyokata Iizumi, Masahiko Tanaka, Shigemi Kohiki, Masaoki Oku,
 Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima

26. Electronic Transport Properties of a Metal-Semiconductor Carbon Nanotube Heterojunction..... 696
 The 15th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS-15)
 Nara, Japan (2003.7.14-18) pp.684-687 No.PB62
 Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Magnetic Properties of Doped Silicon Nanotubes..... 700
 Workshop on Application of Density-Functional Theory in Condensed-Matter Physics, Surface Physics, Chemistry, Engineering, and Biology
 Berlin, Germany (2003.7.21-30) pp.25-26 No.P28
 Abhishek K. Singh, Tina M. Briere, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
28. Phonon DOS of Filled Skutterudite, $Ba_{0.1}CoSb_3$ 701
 The 22nd International Conference on Thermoelectrics (ICT2003)
 La Grande-Motte, France (2003.8.17-21)
 T. Kajitani, Y. Ono, Y. Miyazaki, M. Sluiter, L. Chen, T. Goto and Y. Kawazoe
29. Strength Development of Unhydrated Cement Separated from Fresh Cement Paste..... 702
 Proceedings of the 28th Conference on Our World in Concrete and Structures
 Orchard Plaza, Singapore (2003.8.28-29) pp.459-466
 R. Sakurada, K. Maruyama and Y. Kawazoe
30. Electron Transport in Molecular Enamel Wires..... 710
 Extended Abstracts of the 2003 International Conference on Solid State Devices and Materials, Tokyo (2003.9.16-19) pp.596-597
 Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe

31. Hund's Rule in Large Metal Clusters: An *ab Initio* Study of Cu and Ag Clusters..... 712
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.278 No.D-10-09-O17
 M. Itoh, V. Kumar and Y. Kawazoe
32. Role of Hydrogen in Heat Conduction in Zirconium Hydride..... 713
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.279 No.D-10-10-O03
 K. Konashi, T. Ikeshoji, Y. Kawazoe and H. Matsui
33. Structural Optimization of Nanotube Crystals: Frustrations..... 714
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.280 No.D-10-10-O08
 M. H. F. Sluiter, V. Kumar and Y. Kawazoe
34. Electronic Structure Calculation of the TTTA Molecular Crystal..... 715
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.291 No.D-10-10-P44
 M. Furuya, K. Ohno, J. Takeda and Y. Kawazoe
35. Growth Behavior of Metal Doped Silicon Clusters..... 716
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.292 No.D-10-10-P45
 H. Kawamura, V. Kumar and Y. Kawazoe
36. Quasiparticle Energies of Si₁₂Be Cluster Using the GW Approximation... 717
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.292 D-10-10-P46
 Soh Ishii, Kaoru Ohno, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

37. Quantum Monte Carlo Study of Hund's Multiplicity Rule for Carbon Atom..... 718
 Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials), Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
 Category C&D p.292 D-10-10-P47
 K. Hongo, R. Maezono, Y. Kawazoe and H. Yasuhara
38. *Ab initio* Studies of Transition Metal Encapsulated Silicon Caged Clusters • 719
 11th Foresight Conference on Molecular Nanotechnology
 San Francisco, U.S.A. (2003.10.10-12)
 Marian W. Radny, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
39. *Ab Initio* Study of Hydrogen Hydrate Clathrates for Hydrogen Storage within the ITBL Environment..... 720
 Proceedings of the 5th ISHPC 2003 (International Symposium on High Performance Computing) Tokyo, Japan (2003.10.20-22)
 Lecture Notes in Computer Science 2858 pp.330-341
 Marcel H.F. Sluiter, Rodion V. Belosludov, Amit Jain, Vladimir R. Belosludov, Hitoshi Adachi, Yoshiyuki Kawazoe, Kenji Higuchi and Takayuki Otani
40. Total Energy Surface of Ferroelectric Perovskites..... 732
 Abstracts of the 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations – Cooperated as Computational Science Workshop 2003 (CSW2003)
 Tsukuba, Japan (2003.11.10-12) p.45 No.P17
 Takatoshi Hashimoto, Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Yoshitaka Saito and Yoshiaki Ikeda
41. Quantum Monte Carlo Study of Atomic Systems from He to Ne..... 733
 Abstracts of the 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations – Cooperated as Computational Science Workshop 2003 (CSW2003)
 Tsukuba, Japan (2003.11.10-12) p.47 No.P19
 Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

42. All-Electron *GW* Calculations for Small Silicon Clusters Using an All-Electron Mixed-Basis Approach..... 734
Abstracts of the 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations – Cooperated as Computational Science Workshop 2003 (CSW2003)
Tsukuba, Japan (2003.11.10-12) p.53 No.P25
Soh Ishii, Kaoru Ohno, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
43. *Ab-initio* Study of Cs Insertion and Adsorption in Capped-Nanotubes..... 735
Abstracts of the 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations – Cooperated as Computational Science Workshop 2003 (CSW2003)
Tsukuba, Japan (2003.11.10-12) p.57 No.P29
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
44. Magnetic Properties of Mn-Doped Germanium Nanotubes..... 736
Abstracts of the 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations – Cooperated as Computational Science Workshop 2003 (CSW2003)
Tsukuba, Japan (2003.11.10-12) p.91 No.P63
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe
45. Magnetic Properties of Doped Silicon Nanotubes..... 737
Abstracts of 1st International Symposium on Active Nano-Characterization and Technology
Tsukuba, Japan (2003.11.12-14) pp.251-252 No.P-77
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe
46. Mechanical Response of Nanotube Telescopic Structure under ac Bias..... 739
Abstracts of the 7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-7)
Nara, Japan (2003.11.16-20) p.156 No.19A38
A. A. Farajian, P. M. Ajayan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

51. Genetic Algorithm Approach to Nanoscale Devices: A Case Study of Molecular Wire..... 744
 Abstracts of Nanoscience and Nanotechnology on Quantum Particles
 (NNQP2003) RLNR/Tokyo-Tech 2003 International Symposium
 Tokyo Institute of Technology, Japan (2003 12.15-17) p.47 No.P-15
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov,
 Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
52. Growth Behaviour and Magic Nature of Metal Encapsulated Silicon Clusters..... 745
 Abstracts of Nanoscience and Nanotechnology on Quantum Particles
 (NNQP2003) RLNR/Tokyo-Tech 2003 International Symposium
 Tokyo Institute of Technology, Japan (2003.12.15-17) p.48 No.P-16
 H. Kawamura, V. Kumar and Y. Kawazoe
53. Theoretical Study of Growth Behavior of Cu and Ag Clusters..... 746
 Abstracts of Nanoscience and Nanotechnology on Quantum Particles
 (NNQP2003) RLNR/Tokyo-Tech 2003 International Symposium
 Tokyo Institute of Technology, Japan (2003.12.15-17) p.49 No.P-17
 M. Itoh, V. Kumar and Y. Kawazoe
54. *Ab Initio* Calculation of the Static Hyperpolarizability of Substituted Stilbazolium Cations..... 747
 Abstracts of Nanoscience and Nanotechnology on Quantum Particles
 (NNQP2003) RLNR/Tokyo-Tech 2003 International Symposium
 Tokyo Institute of Technology, Japan (2003.12.15-17) p.50 No.P-18
 S. Saito, H. Mizuseki, S. Wang and Y. Kawazoe
55. Inverse TMR with Coulomb Staircases in Microfabricated Insulating Granular Films..... 748
 ICMFS2003 (The 18th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces)
 Madrid, Spain (2003.7.22-25)
 K. Yakushiji, K. Yamane, S. Mitani, K. Takanashi, F. Ernult and H. Fujimori

56. Spin-Dependent Single-Electron Tunneling Phenomena in Nanofabricated Granular Systems..... 749
 ISM2003 (International Conference on Magnetism 2003)
 Rome, Italy (2003.7.27-8.1) (Poster)
 K. Yakushiji, K. Yamane, M. Matsuura, F. Ernult, S. Mitani,
 K. Takanashi and H. Fujimori
57. Spin Dependent Single Electron Tunneling in Self-Assembled Magnetic Nanoparticles: Effect of Spin Accumulation..... 750
 ISAMT'03 (International Symposium on Advanced Magnetic Technologies 2003)
 Taipei, Taiwan (2003.11.13-16) (Invited talk)
 S. Mitani, K. Yakushiji, F. Ernult, K. Yamane, K. Takanashi and H. Fujimori
58. Spin Dependent Single Electron Tunneling in Self-Assembled Magnetic Nanoparticles..... 751
 NanoMag 2003 (International Workshop on Nano-Scale Magnetoelectronics 2003)
 Nagoya, Japan (2003.11.25-27) (Invited talk)
 K. Takanashi, S. Mitani, K. Yakushiji, F. Ernult and H. Fujimori
59. Inverse Tunnel Magnetoresistance Associated with Coulomb Staircases in Microfabricated Granular Systems..... 752
 NanoMag 2003 (International Workshop on Nano-Scale Magnetoelectronics 2003)
 Nagoya, Japan (2003.11.25-27) (Poster)
 K. Yakushiji, K. Yamane, F. Ernult, M. Matsuura, S. Mitani,
 K. Takanashi and H. Fujimori
60. Spin Dependent Single Electron Tunneling in Self-Assembled Magnetic Nanoparticles..... 753
 2003 SOMMA/KMS meeting (International Symposium on Magnetic Materials and Applications and Winter Conference of the Korean Magnetism Society)
 Daejeon, Korea (2003.12.3-12) (Invited talk)
 K. Takanashi, S. Mitani, K. Yakushiji, F. Ernult and H. Fujimori

<2004 年>

1. 1.Magnetic Properties and Phase Transition of Metal Encapsulated Nanotubes of Silicon and Germanium..... 754
Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) pp.43-44 No.C18
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

2. *Ab-initio* Study of Cs Insertion and Adsorption in Capped-Nanotubes for Field-Emission..... 756
Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) pp.47-48 No.C20
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

3. Hund's Rule and Growth Behavior of Cu and Ag Clusters from *ab initio* Calculations..... 758
Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) pp.113-114 No.PA11
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

4. Genetic Algorithm Approach to Functional Molecules for Nanoscale Devices..... 760
Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) p.145 No.PA27
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

5. Combinatorial Approach on Junction of Porphyrin Chain..... 761
Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) p.146 No.PA28
Yoshiyuki Kikuchi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

6. Quantitative Estimation of the Order-Disorder Phase Transition Temperatures of Cu-Au Systems Using a Face-Centered-Cubic Lattice Model with a Renormalized Potential..... 762
 Joint Meeting: "International Conference on Molecular Simulation (ICMS)" and "Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)"
 Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) pp.176-177 No.PA44
 Ryoji Sahara, Hiroshi Ichikawa, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

7. An Ab Initio Calculation of the Hyperpolarizability of New NLO Materials with π Conjugations..... 764
 21st Century COE-RCMS International Conference, Frontiers of Physical Chemistry on Molecular Materials
 Nagoya, Japan (2004.1.13-14) p.45 No.PA13
 Shigeki Saito, Hiroshi Mizuseki, Shanying Wang, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Yasuhara and Yoshiyuki Kawazoe

8. Novel Encapsulated Nanostructures of Elemental and Compound Semiconductors..... 765
 Japan-Australia Workshop on Advanced Materials
 IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2004.1.15-19) p.7 No.I-6
 Vijay Kumar

9. Alkali Metals Adsorption on the Si(111)-7x7 Surface: From 2D Gas to Magic Clusters..... 766
 Japan-Australia Workshop on Advanced Materials
 IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2004.1.15-19) p.32 No.P-9
 Ke-Hui Wu, T. Briere, Y. Fujikawa, T. Nagao, Q. K. Xue, S. B. Zhang, V. Kumar, Y. Kawazoe and T. Sakurai

10. Phase Transition and Magnetic Properties of Mn-doped Germanium Nanotubes..... 767
 Japan-Australia Workshop on Advanced Materials
 IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2004.1.15-19) p.50 No.P-27
 Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe

11. Atomic Structure and Strain Relaxation in Czochralski-grown $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Bulk Alloys..... 768
 Japan-Australia Workshop on Advanced Materials
 IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2004.1.15-19) p.55 No.P-32
 I. Yonenaga, M. Sakurai, T. Ayuzawa, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe

12. Theoretical Study of Molecular Electronics: A Case Study of Unimolecular Rectifier Using Porphyrin Polymer..... 769
 Nanoscale Devices and System Integration (IEEE NDSI 2004)
 Miami, Florida, U.S.A. (2004.2.15-19) pp.114-116 (Invited talk)
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
 Nobuaki Igarashi and Yoshiyuki Kawazoe

13. Origin of the Electric Dipole Moment in Niobium Clusters..... 772
 March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
 Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART1, p.217 No.B36 6
 K. E. Andersen, W. E. Pickett, V. Kumar and Y. Kawazoe

14. Atomic and Electronic Structures of CdSe Clusters..... 773
 March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
 Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART1, p.455 No.J11 5
 Vijay Kumar, Rodion Belosludov, V. Sundararajan, A. Kasuya and
 Y. Kawazoe

15. Classical Stern-Gerlach Profiles for Mn_5 and Mn_6 Clusters..... 774
 March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
 Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART1, p.611 No.L23 10
 T. Morisato, N.O. Jones, S. N. Khanna, T. Baruah, M. R. Pederson

16. Dynamics and Nano-Clustering of Alkali Metals on the Si(111)-(7x7) Surface..... 775
 March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
 Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART2, p.1350 No.W33 15
 K. H. Wu, T. Briere, Y. Fujikawa, Q. K. Xue, E. G. Wang, Y. Takamura,
 T. Nagao, V. Kumar, Y. Kawazoe, T. Sakurai and S. B. Zhang

17. Inverse TMR in Macrofabricated Granular Systems: Effect of Spin-Accumulation in Nano-Particles..... 776
 The 9th Joint MMM (Magnetism and Magnetic Materials)-Intermag Conference, Anaheim, USA (2004.1.5-9) (Poster)
 K. Yakushiji, K. Yamane, F. Ernult, S. Mitani, K. Takanashi and H. Fujimori
18. Molecular Structure of $\text{La}_2@C_{80}$ and its Raman Spectra..... 777
 21st Century COE-RCMS International Conference, Frontiers of Physical Chemistry on Molecular Materials
 Nagoya, Japan (2004.1.13-14) p.54 No.PA27
 Hidekazu Shimotani, Takayoshi Ito, Atsushi Taninaka, Hisanori Shinohara, Yoshihiko Kubozono, Masaki Takata and Yoshihiro Iwasa
19. Spin Dependent Single Electron Tunneling in Self-Assembled Magnetic Nanoparticles..... 778
 Japan-Australia Workshop on Advanced Materials
 IMR Lecture Hall, Tohoku Univ., (2004.1.15-19) p.3 No.I-3 (Invited Talk)
 K. Takanashi, S. Mitani, K. Yakushiji, F. Ernult and H. Fujimori
20. Quantum Chemical Study of Structure and Raman Spectroscopy of $\text{La}_2@C_{80}$ 779
 18th International Winterschool Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials
 Kirchberg, Austria (2004.3.6-13) p.100 No.PTh10
 Hidekazu Shimotani, Takayoshi Ito, Atsushi Taninaka, Hisanori Shinohara, Yoshihiko Kubozono, Masaki Takata and Yoshihiro Iwasa
21. The Strained Surface Structure of Ge Quantum Dots..... 780
 March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
 Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART2, p.869 No.N32 7
 (Invited talk)
 Yasunori Fujikawa

22. Dynamical DMRG Study of Photoexcited States in One-dimensional Mott Insulators..... 781
March Meeting 2004 (Bulletin of the American Physical Society)
Montreal, Canada (2004.3.22-26) 49[1], PART2, p.1195, No.U38 6
H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa

IV. 紀要等

1. ペロブスカイト型ボライドおよびそれに関連した AuCu_3 型構造化合物の研究..... 783
平成 14 年度 東北大学金属材料研究所 新素材設計開発施設
共同利用研究報告書 (2003.6) pp.160-161
奥 正興, 宍戸統悦, 我妻和明, 孫 強, 川添良幸
2. スーパーSINET、ITBL を活用した複数台のスーパーコンピューター
連結による超大規模第一原理シミュレーション計算による高濃度水素吸蔵氷
の構造決定と物性予測、及びその社会へのインパクト..... 785
平成 14 年度 ITBL (IT Based Laboratory) 成果報告集
(2003.6) ITBL 推進会議 pp.117-120
東北大学金属材料研究所 川添良幸
3. Computational Materials Science..... 789
Tohoku University Bulletin, (2003) pp.178-179
Yoshiyuki Kawazoe and Jing-Zhi Yu
4. Hydrogen Hydrate Clathrates for Hydrogen Storage Studied by All-electron
Full-Potential Ab Initio Calculation..... 790
日本学術振興会 合金状態図第 172 委員会第 5 回研究会資料
(2003.6.13)
Marcel H. F. Sluiter, H. Adachi, Rodion V. Belosludov,
Vladimir R. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
5. Phase Diagram Predictions of Au-Pd and Ag-Pt Alloys..... 795
日本学術振興会 合金状態図第 172 委員会第 6 回研究会資料 3[2]
(2003.11.14-15) pp.78-84
Marcel H. F. Sluiter, C. Colinet, A. Pasturel and Yoshiyuki Kawazoe
6. 超微粒子形成過程の第一原理研究..... 802
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告
平成 15 年度 (2004.6) p.177
川添良幸, 池庄司民夫, 小口多美夫, 石井史之

7. ナノテクノロジーを用いた電子デバイス実現に向けて..... 803
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告
平成 15 年度 (2004.6) p.263
川添良幸

8. 光電子分光スペクトルの第一原理計算..... 804
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告
平成 15 年度 (2004.6) pp.283-284
大野かおる, 川添良幸

V. 予稿集・研究会・講演等

予稿集

<2003 年>

1. Atomic and Electronic Structures of Crystals of Arm-chair and Zig-zag Single Wall Carbon Nanotubes under Hydrostatic Pressure..... 805
第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
淡路 (2003.7.23-25) p.12 No.1-1
Vijay Kumar, Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
2. Simple Model for Structural Transformation of Single Wall Carbon Nanotube Crystals Under Pressure..... 806
第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
淡路 (2003.7.23-25) p.14 No.1-3
Marcel H.F. Sluiter, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. Electronic Transport Properties of a Metal-Semiconductor Carbon Nanotube Heterojunction..... 807
第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
淡路 (2003.7.23-25) p.16 No.1-5
Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
4. Nanotubes Character in Persistent Current..... 808
第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
淡路 (2003.7.23-25) p.20 No.1-9
K. Sasaki, A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
5. Energetics and Electronic Structures of Organics/Carbon Nanotube Compounds..... 809
第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
淡路 (2003.7.23-25) p.53 No.3-42
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki,
Vladimir R. Belosludov, Yoshihiro Iwasa and Yoshiyuki Kawazoe

6. Endohedral Silicon Fullerenes..... 810
 第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
 淡路 (2003.7.23-25) p.82 No.1P-18
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

7. Screening of External Localized Charged Perturbations in Carbon
 Nanotubes..... 811
 第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
 淡路 (2003.7.23-25) p.109 No.1P-45
 Amir A. Farajian, Ken-ichi Sasaki, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

8. Theoretical Study of Molecular Enamel Wire: Geometric Structure and
 Electronic Transport..... 812
 第 25 回フラーレン・ナノチューブ記念シンポジウム 講演要旨集
 淡路 (2003.7.23-25) p.122 No.1P-58
 Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe

9. Realization of Prediction of Materials Properties by *Ab Initio* Computer
 Simulation..... 813
 Proceedings of the 3rd Tohoku Univ.-KAIST/K-JIST Joint Workshop
 Tohoku Univ., Sendai (2003.7.30-8.1)
 Bull. Mater. Sci. 26[1] pp.13-17
 Yoshiyuki Kawazoe

10. Molecular Enamel Wires Based on Polythiophene-Cyclodextrins Inclusion
 ComplexIII..... 818
 第 64 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集
 福岡大学 (2003.8.30-9.2) p.1146 No.1p-S-3
 Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe

11. *Ab-initio* Study of Cs Insertion and Adsorption in Capped-nanotubes for Field Emission..... 819
第 64 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集
福岡大学 (2003.8.30-9.2) p.1204 No.1a-YL-1
Khazaei Mohammad, Farajian Amir, Mizuseki Hiroshi and Kawazoe Yoshiyuki
12. 金研データベース KIND..... 820
第26回材料講習会:各種材料データベースと CAE 利用技術の新展開
立命館大学 (2003.9.18-19) pp.52-56
川添良幸、余 京智、竹内 章、伊藤敏行、和田繁男
13. 第一原理計算による Fe、Mo をドープした SrTiO₃ の磁性の評価..... 825
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.579 No.21aTH-13
北村周平、西松 毅、水関博志、川添良幸
14. 分子性結晶 TTTA の電子状態と反射スペクトル..... 826
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.757 No.23aXE-9
古谷未央、大野かおる、川添良幸、武田 淳
15. 永久電流に見えるナノチューブの特殊性..... 827
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.759 No.23aXF-2
佐々木健一、川添良幸
16. 金属原子内包シリコン・クラスターの GW 準粒子エネルギー計算..... 828
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.815 No.22aYC-12
石井 聡、大野かおる、Vijay Kumar、川添良幸

17. 全電子混合基底法によるシリコン自己格子間原子と原子空孔の
XPS スペクトルの予想・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 829
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.856 No.21pXA-6
西松 毅、Marcel Sluiter、水関博志、川添良幸、宮田正靖、佐藤 譲、
上原正光
18. ペロブスカイト型強誘電体のより正確なエネルギー表面の表式化・・・・・・・・ 830
日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 4 分冊 p.870 No.22pXA-4
橋本孝俊、西松 毅、水関博志、川添良幸、斉藤義孝、池田義秋
19. Novel Fullerene and Nanotube Structures of Silicon by Metal Encapsulation and
Their Analogs in Compound Semiconductors・・・・・・・・・・・・ 831
第 10 回準結晶研究会
北海道大学 (2003.10.8-10)
Vijay Kumar
20. *Ab Initio* Studies of Nanomaterials・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 832
Abstracts of The Japan-India Seminar on Materials Education and
Research Strategy and New Materials
Pasifico Yokohama (2003.10.9-12)
Yoshiyuki Kawazoe and Amit Jain
21. Novel Fullerene and Nanotube Structures of Silicon by Metal Encapsulation
and Their Analogs in Compound Semiconductors・・・・・・・・・・・・ 833
第 133 回秋期大会 日本金属学会講演概要
北海道大学 (2003.10.11-13) p.127 No.S5-1
Vijay Kumar
22. Magnetic Properties of Transition Metal Doped Nanotubes of Germanium • 833
第 133 回秋期大会 日本金属学会講演概要
北海道大学 (2003.10.11-13) p.127 No.S5-2
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe

23. Cu, Ag クラスターの第一原理計算..... 834
第 133 回秋期大会 日本金属学会講演概要
北海道大学 (2003.10.11-13) p.128 No. S5-3
伊藤正寛, Vijay Kumar, 川添良幸
24. メタルドープシリコンクラスターの水分子に対する安定性の解析..... 834
第 133 回秋期大会 日本金属学会講演概要
北海道大学 (2003.10.11-13) p.128 No. S5-4
川村博昭, Vijay Kumar, 川添良幸
25. 第一原理計算による分子デバイス設計..... 835
第 133 回秋期大会 日本金属学会講演概要
北海道大学 (2003.10.11-13) p.129 No. S5-6
水関博志, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hao Chen,
五十嵐伸昭, 川添良幸
26. Characteristic Behavior of Carbon Nanotubes Under Magnetic Fields..... 836
Abstracts of 2003 Interim Reports by Young Researchers
(International Center of Research and Education for Materials)
Tohoku Univ. Materials Research Center (2003.10.27) p.14
Kenichi Sasaki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Alkali Metals Adsorption on the Si(111)-7x7 Surface: From 2D Gas to Magic Clusters..... 837
JSPS-Tohoku University Seminar
—The Grand Challenges in a Pervasive Nanotechnology—
IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2003.10.31) p.9
Ke-Hui Wu, T. Briere, Y. Fujikawa, T. Nagao, Q. K. Xue, S. B. Zhang,
V. Kumar, Y. Kawazoe and T. Sakurai
28. Phase Transition and Magnetic Properties of Mn-doped Germanium Nanotubes..... 838
JSPS-Tohoku University Seminar
—The Grand Challenges in a Pervasive Nanotechnology—
IMR Lecture Hall, Tohoku Univ. (2003.10.31) p.28
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe

29. ペロブスカイト型化合物 $RRh_3B_xC_{1-x}$ ($R=La, Gd, Lu, Y, Sc, 0 \leq x \leq 1$) の硬さに関する研究..... 839
第 48 回人工結晶討論会 甲府市 (2003.11.4-5)
穴戸統悦、葉 金花、岡田 繁、工藤邦男、飯泉清賢、奥 正興、
石沢芳夫、田中雅彦、野村明子、菅原孝昌、小原和夫、大石修治、
亀頭直樹、天野忠昭、古曳重美、川添良幸、中嶋一雄
30. 第一原理計算による分子デバイス設計 II 841
2003 年度日本金属学会東北支部大会 研究発表会概要集
弘前大学 (2003.11.15) p.3
水関博志, 菊地良幸, 五十嵐伸昭, Rodion V. Belosludov,
Amir A. Farajian, Chiranjib Majumder, Jian-Tao Wang, Hao Chen, 川添良幸
31. 第一原理計算による Fe, Mo をドープした $SrTiO_3$ の磁性の評価..... 842
2003 年度日本金属学会東北支部大会 研究発表会概要集
弘前大学 (2003.11.15) p.4
北村周平, 西松 毅, 水関博志, 川添良幸, 川崎雅司
32. Novel Metal Doped Fullerenelike Nanoclusters of Silicon and Predictions of
Photoluminescence from Ab Initio Calculations..... 843
シリコン材料の科学と技術フォーラム
湘南国際村センター (2003.11.25-27)
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
33. 第一原理計算による Fe, Mo をドープした $SrTiO_3$ の磁性の評価..... 846
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.16
北村周平, 西松 毅, 水関博志, 川添良幸, 川崎雅司
34. ペロブスカイト型強誘電体のエネルギー表面の表式化..... 847
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.17
橋本孝俊, 西松 毅, 水関博志, 川添良幸, 斉藤義孝, 池田義秋
35. 2 次非線形有機 DAST 結晶のカチオン超分極率計算..... 848
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.18
斎藤繁喜, 水関博志, 王 山鷹, 川添良幸

36. Magnetic Interaction of Double Transition Metal Impurities in
TiO₂-Rutile..... 849
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.19
P. Murugan, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Nishimatsu, M. Kawasaki
and Y. Kawazoe
37. Hund's Rule, Electronic Structures and Growth Behavior of Cu and Ag Clusters
from *Ab Initio* Calculations..... 850
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.20
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
38. Phase Transition and Magnetic Properties of Mn-doped Germanium
Nanotubes..... 851
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.21
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar, Tina M. Briere and Yoshiyuki Kawazoe
39. *Ab-Initio* Study of Cs Insertion and Adsorption in Capped-Nanotubes..... 852
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.22
Mohammad Khazaei, Amir. A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and
Yoshiyuki Kawazoe
40. An Orbital-Dependent Exchange-Correlation Energy Functional for the Study
of Strongly-Correlated Electronic Systems in Density-Functional Theory... 853
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.23
Hiroshi Yasuhara, Masahiko Higuchi and Yoshiyuki Kawazoe
41. *Ab-initio* Study on the Electronic Structure of Icosahedral Ti Clusters..... 854
金属材料研究所 第 106 回講演会 秋季講演会 (2003.11.27-28) p.24
Shan-Ying Wang, Jing-Zhi Yu, Chong-Yu Wang and Yoshiyuki Kawazoe
42. 第一原理計算による2次非線形有機 DAST 結晶の設計
—カチオン超分極率計算における基底関数系・電子相関の影響—..... 855
第 58 回応用物理学会東北支部学術講演会 講演予稿集
岩手大学 (2003.12.4-5) pp.84-85 No.5p-A3
斎藤繁喜、水関博志, 王 山鷹、川添良幸

43. ポルフィリン高分子を用いた分子デバイスの可能性..... 857
第 58 回応用物理学会東北支部学術講演会 講演予稿集
岩手大学 (2003.12.4-5) pp.100-101 No.5p-A10
菊地良幸, 水関博志, 五十嵐伸昭, Rodion V. Belosludov,
Amir A. Farajian, 川添良幸
44. Materials Design for Nanotechnology by *ab initio* Computer Simulation... 859
Abstracts of Japan-Taiwan Joint Seminar Toward Formation of New Network
Between Physics and Chemistry On the Frontiers of Material Science
National Taiwan University (2003.12.5-7) p.IN-29
Yoshiyuki Kawazoe
45. Molecular Orbital Analysis of Frontier Orbitals for Molecular Electronics... 860
Abstracts of Japan-Taiwan Joint Seminar Toward Formation of New Network
Between Physics and Chemistry On the Frontiers of Material Science
National Taiwan University (2003.12.5-7) p.P-11
Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and
Yoshiyuki Kawazoe
46. Large Scale Simulations with the Full-Potential All-Electron Mixed-Basis
Method TOMBO..... 861
Abstracts of Japan-Taiwan Joint Seminar toward Formation of New Network
Between Physics and Chemistry On the Frontiers of Material Science
National Taiwan University (2003.12.5-7) p.P-15
M. Sluiter, H. Adachi, A. Jain and Y. Kawazoe
47. Study of Structure and Bonding in MgO Clusters Using All Electron Mixed
Basis Approach..... 862
Abstracts of Japan-Taiwan Joint Seminar Toward Formation of New Network
Between Physics and Chemistry On the Frontiers of Material Science
National Taiwan University (2003.12.5-7) p.P-16
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

48. Study of Structure and Bonding of Small MgO Clusters from *Ab initio* Calculations..... 863
 Abstracts of Indo-Japan Workshop on Advanced Molecular Electronics and Bionics
 Graduate School of Life Science and Systems Engineering Kyusyu Institute of Technology, Kitakyushu (2003.12.11-13) pp.45-46
 Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
49. ペロブスカイト型固溶体 $RRh_3B_xC_{1-x}$ ($R=Y, Sc; 0 \leq x \leq 1$) の硬さと耐酸化性..... 865
 第2回国内、ホウ素・ホウ化物研究会
 松島 (2003.12.12-13) pp.4-5
 宍戸統悦, 葉 金花, 岡田 繁, 工藤邦男, 飯泉清賢, 奥 正興, 石沢芳夫, 田中雅彦, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎, 小原和夫, 大石修治, 亀頭直樹, 天野忠昭, 古曳重美, 東以和美, 川添良幸, 中嶋一雄
50. 微小 CPP 構造磁性グラニューラー薄膜のスピンの依存単一電子トンネル現象..... 867
 第 64 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集
 福岡大学 (2003.8.30-9.2) p.1334 No.30p-H-10
 山根一陽、薬師寺啓、Franck Ernult、三谷誠司、高梨弘毅、藤森啓安
51. 微小 CPP 構造グラニューラー薄膜における TMR の符号反転現象..... 868
 第 27 回日本応用磁気学会学術講演会 講演概要集
 大阪大学 (2003.9.16-19) p.439 No.19pA-4
 薬師寺啓、山根一陽、エルヌ フランク、三谷誠司、高梨弘毅、藤森啓安
52. Interplay of Spin Accumulation and Single Electron Tunneling in Double Tunnel Junctions..... 869
 第 27 回日本応用磁気学会学術講演会 講演概要集
 大阪大学 (2003.9.16-19) p.440 No.19pA-5
 エルヌ フランク、三谷誠司、山根一陽、薬師寺啓、高梨弘毅、藤森啓安

53. CuO 鎖における電荷密度波の数値的研究…………… 870
 日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
 岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 3 分冊 p.444 No.20pTM-16
 森 道康、Jose A. Riera、遠山貴己、前川禎通
54. 磁場下でのナノ超伝導板の準粒子構造…………… 871
 日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
 岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 3 分冊 p.523 No.22aPS-53
 末松久孝、加藤 勝、石田武和
55. ナノ超伝導複合体(d-dot)における磁束構造 II…………… 872
 日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
 岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 3 分冊 p.524 No.22aPS-56
 赤穂雅之、加藤 勝、石田武和
56. 2 つの強磁性体と超伝導体との接合系における交差アンドレーエフ反射の理論…………… 873
 日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
 岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 3 分冊 p.391 No.21pPSA-13
 山下太郎、高橋三郎、前川禎通
57. 微小 CPP 構造グラニューラー薄膜におけるクーロン階段と TMR の符号反転…………… 874
 日本物理学会 2003 年秋季大会 講演概要集
 岡山大学(2003.9.20-23) 第 58 巻第 2 号第 3 分冊 p.421 No.22pWA-12
 薬師寺啓、山根一陽、フランク エルヌ、三谷誠司、高梨弘毅、藤森啓安
58. バナジウムと絶縁セラミックスとの界面における電子状態計算と接合に及ぼす界面近傍の化学組成の影響…………… 875
 第 133 回日本金属学会講演会秋期大会 講演概要
 北海道大学 (2003.10.11-13) p.301
 佐藤 学、小松信彦、澤田智世、阿部勝憲

59. Effect of Operating Conditions on Spoke Pattern on Oxide Melt Surface in Czochralski Crucible..... 876
 Abstracts of the 4th International Workshop on Modeling in Crystal Growth
 Fukuoka, Japan (2003.11.4-7) pp.184-185
 C.J. Jing, M. Kobayashi, T. Tsukada, M. Hozawa, N. Imaishi,
 K. Shimamura and N. Ichinose
60. Optical Excitations in a 1D Correlated Electron System with Phonon Degrees of Freedom..... 878
 Abstracts of TMO2003 (The 3rd International Workshop on Novel
 Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides)
 Sendai (2003.11.5-8) p.121 No.P3-40
 Hiroaki Matsueda, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
61. 密度行列繰り込み群法による1次元強相関電子系の光学応答の研究... 879
 金属材料研究所第106回講演会 秋季講演会(2003.11.27-28) p.1 No.1
 松枝宏明、遠山貴己、前川禎通
62. Limiting Current-Carrying Characteristics of Ag-Sheathed $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ Tape..... 880
 第69回 2003年度秋季低温工学・超電導学会 講演概要集
 島根 (2003.12.3-5) p.30 No.1B-a09
 V.R. Romanovskii, G. Nishijima, S. Awaji, Ken-ichiro Takahashi and
 K. Watanabe
- <2004年>
1. Site Preference in Frank-Kasper Intermetallic Compounds..... 881
 TMS2004 (133rd Annual Meeting & Exhibition)
 Charlotte, North Carolina, U.S.A. (2004.3.14-18)
 Marcel H.F. Sluiter, Alain Pasturel and Yoshiyuki Kawazoe
2. 第一原理計算による分子デバイス設計..... 882
 第2回ナノテクノロジー総合シンポジウム JAPAN NANO 2004
 講演予稿集
 東京(2004.3.15-17) pp.182-183
 水関博志、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、川添良幸

3. 量子モンテカルロ法による水素分子の研究..... 884
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 卷 No.28pWN-7
 本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
4. 第一原理 GW 近似によるベンゼン分子の準粒子エネルギー計算..... 885
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 2 分冊 p.196 No.30aXN-8
 石井 聡、大野かおる、川添良幸
5. 変形したナノチューブにおける低エネルギー特性
 –Local energy gap 生成機構–..... 886
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.865 No.29pZP-5
 佐々木健一、川添良幸、齊藤理一郎
6. テラヘルツ波発生のための非線形有機 DAST 結晶の計算設計
 –分子軌道法からのアプローチ–..... 887
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.871 No. 30aWN-2
 斎藤繁喜、水関博志、王 山鷹、高橋まさえ、川添良幸
7. 安定な II–VI 族半導体ナノ粒子、 $(\text{CdSe})_{33}$ 、 $(\text{CdSe})_{34}$ の大量合成と
 構造解析..... 888
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.884 No.27aWR-6
 粕谷厚生、V. Romanyuk、V. Kumar、R. Belosludov、川添良幸
8. 第 1 原理計算と STM 観測による $\text{Si}(313)12\times 1$ 再構成表面の原子構造の
 研究..... 889
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.913 No.28pWP-5
 高橋まさえ、Vijay Kumar、川添良幸、Weisheng Yang、櫻井利夫

9. ボロン水素複合欠陥による n 型ダイヤモンドの可能性についての
第一原理計算..... 890
日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.943 No.27aXT-9
織田 望、西松 毅、吉田 博
10. ペロブスカイト型強誘電体の全エネルギー表面の谷底線の
第一原理計算..... 891
日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.975 No.29pXK-4
橋本孝俊、西松 毅、水関博志、川添良幸、佐々木淳、池田義秋
11. 第一原理計算による分子被覆導線の電子状態と電気伝導特性..... 892
第 51 回応用物理学関係連合講演会 春季講演予稿集
東京工科大学(2004.3.28-31) 3 p.1496 No.29p-ZQ-3
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 水関博志、川添良幸
12. 第一原理計算によるポルフィリン分子の電気伝導性の検討..... 893
第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
東京工業大学(2004.3.30-4.1)p.244
水関博志、菊地良幸、馬場英年、五十嵐伸昭, R.V. Belosludov,
A. A. Farajian, 川添良幸
13. ロジウムクラスターと水素の相互作用に関する研究..... 893
第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
東京工業大学(2004.3.30-4.1)p.244
斐 栄造, 長内弘喜, Vijay Kumar, 川添良幸
14. Phase Diagram Predictions of Au-Pd and Ag-Pt Alloys..... 894
第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
東京工業大学(2004.3.30-4.1)p.342
M. Sluiter, C. Colinet, A. Pasturel and Y. Kawazoe
15. ペロブスカイト型化合物 $\text{ScRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$ の硬度に関する第一原理計算..... 895
第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
東京工業大学(2004.3.30-4.1)p.399
佐原亮二, 宍戸統悦, Vijay Kumar, 川添良幸

16. 第一原理計算による分子デバイス設計 II 896
第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
東京工業大学(2004.3.30-4.1)p.470
水関博志, 馬場英年, 五十嵐伸昭, R. V. Belosludov, A.A. Farajian,
O. V. Pupysheva, 川添良幸
17. Reconsideration of Molecular Structure of $\text{La}_2@C_{80}$ and its Raman
Spectra 897
第 26 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム
岡崎、愛知(2004.1.7-9) 3-9 p.48
Hidekazu Shimotani, Takayoshi Ito, Atsushi Taninaka, Hisanori Shinohara,
Yoshihiko Kubozono, Masaki Takata and Yoshihiro Iwasa
18. Dynamical DMRG Study of Photoexcited States in 1D Mott Insulators... 898
TMO2003 成果報告会
東京大学 (2004.1.19-21)
H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa
19. 一次元 Mott 絶縁体における光励起状態の動的 DMRG 法による研究... 899
NAREGI ナノサイエンス実証研究第2回公開シンポジウム
岡崎、愛知(2004.2.23-24) No.2P18
松枝宏明、遠山貴己、前川禎通
20. Dynamical DMRG Study of Photoexcited States in 1D Mott Insulators... 900
Abstracts of IFCAM Workshop, IMR (2004.3.3-5) p.68 No.P38
H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa
21. ナノ超伝導複合体 d-dot における磁束ダイナミクス 901
日本物理学会 第 59 回年次大会 講演概要集
九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 3 分冊 p.567 No.28aPS-54
赤穂雅之、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和
22. 磁場下でのナノ超伝導板の準粒子構造 II 902
日本物理学会 第 59 回年次大会 講演概要集
九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.678 No.27pYG-6
末松久孝、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和

23. 一次元 Mott 絶縁体における光励起状態の動的 DMRG 法による研究・・・ 903
 日本物理学会第 59 回年次大会 講演概要集
 九州大学(2004.3.27-30) 第 59 巻第 1 号第 4 分冊 p.739 No.28pXF-8
 松枝宏明、遠山貴己、前川禎通
24. バナジウム合金とカルシアとの接合における理想界面強度の
 第一原理計算・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 904
 第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
 東京工業大学 (2004.3.30-4.1) p.304
 佐藤 学、阿部勝憲
25. 転位とボイドの相互作用の計算機シミュレーション・・・・・・・・ 905
 第 134 回日本金属学会講演会春期大会 講演概要集
 東京工業大学 (2004.3.30-4.1) p.307
 佐藤裕樹、二田伸康、松井秀樹

講演会

1. 本物のナノテクノロジーとはー第一原理計算進展とナノテクノロジーへの応用ー
 第 24 回 JASVA アクションセミナー 東京神田明神会館 (2003.9.11)
 川添良幸
2. 第一原理計算の進展とナノテクノロジー用新物質設計
 INSAM シンポジウム 2003 広島大学理学部 (2004.1.10)
 川添良幸
3. 新物質予言を可能とする極限的量子学計算法開発とその適用例
 21 世紀 COE プログラム COE 学術講演
 Advanced Metal Oxide Nanostructures from Aqueous Solutions
 京都大学福井謙一記念研究センター (2004.3.3)
 川添良幸
4. 極限的量子力学計算と新物質予言
 第 31 回 GLT・生活環境系特別研究体セミナー
 産業技術総合研究所 関西センター (2004. 3.16)
 川添良幸

研究会

1. ナノテクノロジーを用いた電子デバイス実現に向けて
平成 15 年度 東北大学金属材料研究所 研究会
金属材料研究所 (2004.1.15-16)

VI. 新聞記事等

1. 『新ナノ粒子は計算機で見つけ実験で製法開発するのが効率的』…… 907
日経ナノテクノロジー ニュース記事 (2003.6.20)
2. 『カーボンナノチューブと有機分子の複合新材料電気伝導性を自在に制御
次世代半導体材料に有望』…… 908
科学新聞 (2003.9.19)
3. 『Mn 内包 Si チューブがスピントロニクス材料に―東北大川添研』…… 909
日経ナノテクノロジー ニュース記事 (2003.10.7)
4. 『日立東日本ソリューションズ, 東北大 川添研の第一原理計算ソフト
市販へ』…… 911
日経ナノテクノロジー PLUS 記事 (2003.10.16)
5. 『合金フラーレン発見 東北大 ナノテクに新たな可能性』…… 912
日刊工業新聞 (2004.1.27)
6. 『球状ナノ分子 2 種類の元素で形成』…… 913
日本経済新聞 (2004.2.13)
7. 『日経 BP と清華大学, 4 月に北京でナノテク・フォーラム開催へ』…… 914
日経ナノテクノロジー ニュース記事 (2004.3.5) pp.1-2
8. 『東北大学金属材料研究所が IBM の SUR アワードを受賞』…… 916
IBM NEWS (2004.3.17) pp.1-2

VII. 雑誌等掲載解説記事

1. 『Preface : Symposium D-10 Computational Materials Science and Materials Design & Processing』..... 918
Abstracts of the IUMRS-ICAM 2003 (The 8th IUMRS International Conference on Advanced Materials) Yokohama, Japan (2003.10.8-13)
Category C&D p.271
Yoshiyuki Kawazoe, Tamio Ikeshoji, Masanori Kohyama, Satoshi Watanabe, Isao Tanaka, Toshiyuki Koyama, Kaoru Ohno, Makoto Yoneya and Koichi Kakimoto
2. 『Nanotechnology research using supercomputers』..... 919
National Institute of Informatics News, 6 (2003) pp.2-3
SUPER SINET Research No. 2
Yoshiyuki Kawazoe
3. 『Magnetic Superatoms』..... 921
Nature Materials, 2 (2003.11) p.704
4. 『イノベーションを醸成する教育がナノテクには必須！！』..... 922
週刊ナノテクワールド 創刊準備2号, (2003.6.16) pp.4-5
川添良幸
5. 『IPMM'03, ナノテク加工の知的処理をテーマに開催(1)』..... 924
週刊ナノテク, 1123 (2003.7.14) p.32
6. 『IPMM'03, ナノテク加工の知的処理をテーマに開催(2)』..... 925
週刊ナノテク, 1124 (2003.7.21) p.32
7. 『ナノ学会創立大会に見る最新ナノテク研究 (1) 』..... 926
週刊ナノテク, 1125 (2003.7.28) pp.28-29
8. 『東北大、第一原理計算と実験で CdSe の安定構造を確認』..... 927
週刊ナノテク, 1149 (2004.2.16)p.18

9. 『東北大学金研、電子デバイスをテーマにナノテク研究会』…………… 928
週刊ナノテク, 1148 (2004.2.9) p.18
10. 『ナノスケールのクラスターと構造体:理論, 実験, シミュレーション』…………… 929
IMR ニュース KINKEN, 41 (2003 SPRING, SUMMER) p.5
大野かおる, 川添良幸
11. 『材料の知的製造と加工に関する国際会議』…………… 930
IMR ニュース KINKEN, 42 (2003 AUTUMN) p.6
川添良幸
12. 『平成 15 年度後期・客員教官 就任の挨拶
国外客員教官 クマール・ヴィジェイ博士財団 Vijay Kumar』…………… 931
新素材 施設ニュース, 23 (2003.10) p.2
13. 『東北大の大内教授 G がん転移の診断部位を蛍光で検出』…………… 932
日経 先端技術, 55 (2004.2.9) p.5
14. 『金属の密林の大いなる開拓者を目指す若き研究者達・
金属材料研究所』…………… 933
東北大学概要, (2003) pp.7-8
15. 『フラーレンとカーボンナノチューブ:ナノスケールの物質デザイン』…………… 935
東北大学学報, 1593 (2003.10.1) 表紙図
16. 『カーボンナノチューブ』…………… 937
電気学会誌, 123 (2003.11.1) 表紙図・説明
17. 『single-walled carbon nanotubes』…………… 939
Nature Materials, 2[10] (2003.10) cover, cover story

VIII. 書籍

1. 『Structure and Properties of Aperiodic Materials』…………… 941
Springer, Advances in Materials Research, 5 (2003)
Y. Kawazoe and Y. Waseda

IX. 表彰授与

1. Corporate University Relations International Business Machines
Corporation…………… 942
『IBM Shared University Research (SUR) Award』受賞
川添良幸 (2004.1.27)

X. その他

1. 本所情報関係委員会・学内情報関連委員…………… 943
2. 計算材料学センター長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員等一覧… 944
3. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 945
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図…………… 948