

# 2004 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

(2004 年 4 月～2005 年 3 月)

## 目次

### 巻頭言

#### I. 研究内容概要

1. 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..... 1  
東北大学金属材料研究所 水関博志、Rodion V. Belosludov、  
Amir A. Farajian、Olga V. Pupysheva、上原朋樹、馬場英年、五十嵐伸昭、  
野手竜之介、川添良幸
2. Permanent Electric Dipole Moments in Niobium Clusters..... 5  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe  
Dep. of Phys., University of California K. E. Andersen, Warren E. Pikett
3. Growth, Magic Behavior, Electronic, Vibrational and Adsorption Properties of  
Metal Encapsulated Silicon Clusters..... 8  
New Frontiers Research Lab., Toray Industries, Inc. H. Kawamura  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, Y. Kawazoe
4. Smallest Magic Clusters of Si, Ge, Sn, and Pb by Metal Encapsulation..... 12  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh and  
Yoshiyuki Kawazoe
5. First-Principles Based Design and Experimental Evidence for a ZnO-Based  
Ferromagnet at Room Temperature..... 14  
IMR, Tohoku University Marcel H.F. Sluiter and Y. Kawazoe  
Jawaharlal Nehru Centre Adv. Sci. Res., India U.V. Waghmare
6. Moleculare Electronics and Bioinorganic Materials..... 19  
IMR, Tohoku University Michael R. Philpott and Y. Kawazoe

7. 第一原理計算によるペロブスカイト型希土類ロジウムホウ化物および炭化物の構造および機械的特性の評価..... 21  
 東北大学金属材料研究所 佐原亮二、 宍戸統悦、 野村明子、  
 Vijay Kumar、中嶋一雄、川添良幸  
 神奈川大学工学部 工藤邦男  
 国士舘大学工学部都市システム工学科 岡田 繁
  
8. 平面構造をもつアニオン性ポリシリコンと  $D_{6h}$  対称性をもつアニオン性ケイ素6員環の理論計算..... 26  
 東北大学金属材料研究所 高橋まさえ、川添良幸
  
9. Theoretical Study of Different Molecular Structures: Application for Nanoelectronics..... 29  
 IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, A.A. Frajjan, H. Baba,  
 H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe
  
10. First-Principles Nanomaterial Design for Application in Nanomedicine..... 31  
 IMR Tohoku University R.V. Belosludov, V. Kumar, H. Mizuseki and  
 Y. Kawazoe  
 Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University A. Kasuya
  
11. Configuration of Organic Molecules inside Carbon Nanotube..... 32  
 IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Takenobu,  
 Y. Iwasa and Y. Kawazoe
  
12. Description of Nucleation Mechanism and Self-Preservation Effect in Clathrate Hydrates Using the Accurate Atomistic Models..... 33  
 Institute of Inorganic Chemistry, Russia V.R. Belosludov and O.S. Subbotin  
 IMR Tohoku University R.V. Belosludov, T.M. Inerbaev and Y. Kawazoe
  
13. Modelling of the Structure and Vibrational Properties of LDA, HDA, and VHDA Amorphous Ices..... 35  
 Institute of Inorganic Chemistry, Russia V.R. Belosludov and O.S. Subbotin  
 IMR Tohoku University T.M. Inerbaev, R.V. Belosludov and Y. Kawazoe

14. A General-Purpose Program for Computing Transport in Contact-Molecule-Contact Systems: Application to Polythiophene-Based Nanodevices..... 37  
IMR, Tohoku University A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
15. *Ab initio* Study of MgO Clusters by All Electron Mixed-Basis Program TOMBO..... 39  
IMR, Tohoku University Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
16. First Principles Studies of Zinc Oxide Clusters..... 42  
IMR, Tohoku University Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
17. Atomic Structures and Magnetism of Stoichiometric MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> Clusters..... 44  
IMR Tohoku University P. Murugan, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe  
Hitachi Maxell Ltd. Norio Ota
18. カーボンナノチューブ系における幾何構造と物性..... 49  
東北大学金属材料研究所 佐々木健一、川添良幸
19. Theoretical Study of Hydrogen Hydrate and Amorphous Ices Lattice Dynamics, Electronic Properties of C<sub>60</sub> Linear Polymers and NLO Active Materials... 53  
IMR, Tohoku University Talgat M. Inerbaev, Yoshiyuki Kawazoe
20. Interaction of Single-Walled Carbon Nanotubes with Alkylamines: An *ab initio* Study..... 58  
IMR, Tohoku University Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe  
National Institute for Materials Science Hitoshi Nejo
21. *Ab initio* Study of the Electronic Structure and Conductance of DNA Double Helix..... 59  
IMR, Tohoku University Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

22. Design of a Very Thin Direct-Band Gap Semiconductor Nanotube of Germanium with Metal Encapsulation..... 60  
IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
23. Stabilizing the Silicon Fullerene Si<sub>20</sub> by Thorium Encapsulation..... 62  
IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
24. The First Principles Study of Pt Cluster Adsorbed on Carbon Nanotube..... 63  
IMR, Tohoku University G. Chen and Y. Kawazoe
25. Field Emission Patterns through First Principle Calculations..... 72  
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
26. 第一原理計算による Na, Cu クラスターの原子配列と電子状態の比較..... 76  
東北大学金属材料研究所 伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
27. テラヘルツ周波数領域の物性計算とテラヘルツ新結晶設計..... 81  
東北大学金属材料研究所 斎藤繁喜、高橋まさえ、水関博志、Talgat M. Inerbaev、五十嵐伸昭、川添良幸
28. *Ab Initio* Study of Hyperfine Parameters Using the All-Electron Mixed-Basis Method..... 84  
IMR, Tohoku University Mohammad Saeed Bahramy, Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
29. 金属ポルフィリンオリゴマーの導電率の理論的解析..... 89  
東北大学金属材料研究所 馬場英年、R.V. Belosludov, A.A. Farajian, 水関博志、川添良幸
30. 量子モンテカルロ法によるフント則の研究..... 94  
東北大学金属材料研究所 本郷研太、小山田隆行、安原 洋、川添良幸  
物質・材料研究機構 前園 涼

31. 格子歪みにより誘起された SrTiO<sub>3</sub> の強誘電相の第一原理計算…………… 97  
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
32. GW 近似による一酸化炭素分子の励起エネルギー計算…………… 99  
横浜国立大学 工学研究科 石井 聡、大野かおる  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
33. 4d 遷移金属クラスターの非稠密構造…………… 101  
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
34. 第一原理分子動力学法によるセメント水和物の構造特性の評価…………… 104  
秋田高専環境都市工学科 桜田良治  
University of Texas M.D. Anderson Cancer Center Tina Marie Briere  
東北大学金属材料研究所 Abhishek Kumar Singh、川添良幸
35. 全電子混合基底法やその他の手法を用いた高精度計算…………… 106  
横浜国立大学大学院工学研究院 大野かおる、石井 聡  
山形大学理学部物理学科 高橋良雄、吉成武久、長坂慎一郎  
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、志田和人、水関博志、川添良幸
36. 全電子混合基底法による第一原理計算と他の方法との比較…………… 109  
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
37. 生体高分子の構造と機能: 新材料への応用に向けて…………… 110  
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
38. Encapsulation of Halide Anions into Si<sub>20</sub>H<sub>20</sub>…………… 111  
COE Laboratory, IMRAM, Tohoku University Fabio Pichierri  
IMR, Tohoku University Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe

39. 凝縮系中のナノ構造制御による機能発現..... 115  
山口大学工学部 松浦 満  
山口大学メディア基盤センター 赤井光治  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
40. 大規模第一原理計算手法の開発と強誘電体の物性予測..... 117  
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  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. 量子モンテカルロ法による第一原理計算手法の研究..... 119  
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、小山田隆行、安原 洋、馬場英年、  
水関博志、高橋まさえ、ヴィージェイ・クマール、川添良幸
42. 光解離分光による  $\text{Cr}_3^+$  の構造研究..... 122  
株式会社コンボン研究所 間嶋拓也  
東京大学大学院理学系研究科 登野健介  
豊田工業大学 寺寄 亨、近藤 保  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
43. マンガン酸化物クラスター正イオンの磁気特性..... 123  
東京大学大学院理学系研究科 登野健介  
豊田工業大学 寺寄 亨、太田俊明、近藤 保  
東北大学金属材料研究所 川添良幸
44. 金属クラスターと分子との反応..... 124  
豊田工業大学 市橋正彦、近藤 保  
東北大学金属材料研究所 Marcel Sluiter、川添良幸
45. Synoptic Perspective on Past, Ongoing and Planned Future Use of CMS  
Supercomputer..... 126  
IMR, Tohoku University Fanica Cimpoesu and Y. Kawazoe
46. 64bit Linux システム上での TOMBO システムの稼働..... 135  
東北大学加齢医学研究所 池田 誠  
東北大学金属材料研究所 川添良幸

47. Report of Studies on Nano Silicon and Nano Gold Structures·····	136
Physics Dep., Virginia Commonwealth University Q. Sun	
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe	
48. Report of Studies on Diluted Magnetic Semiconductors Thin Films·····	138
Physics Dep., Virginia Commonwealth University Q. Wang	
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe	
49. Dynamic Formation Process of Bi Line Structure on Si (100) Surface	
Inst. of Phys., Chinese Academy of Sciences, China Jian-Tao Wang,	
Ding-Sheng Wang, En-Ge Wang·····	140
IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe	
Dep. of Electrical Engineering, Kyushu Institute of Technology	
Masamichi Naitoh, Satoshi Nishigaki	
50. Revised Boussinesq Approximation in Rotating Flow·····	142
IMR, Tohoku University Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and	
Yoshiyuki Kawazoe	
51. First Principles Studies on Transition Metal Cluster and Nonlinear Optical	
Organic Molecular Crystal·····	144
IMR, Tohoku University Shan-Ying Wang and Yoshiyuki Kawazoe	
52. Electron Transport Through Heterocyclic Molecule: an <i>ab initio</i>	
Calculation·····	145
Physics Dep., Fudan University, China W.W. Cheng, Y.X. Liao, H. Chen,	
IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	
53. 銅酸化物高温超伝導体におけるモット絶縁体近傍の	
電子・ホール非対称性·····	149
東北大学金属材料研究所 遠山貴己	
54. 磁性半導体中の磁気不純物準位と強磁性相互作用·····	150
東北大学金属材料研究所 高橋三郎	
55. 一次元モット絶縁体の光学応答における励起子効果·····	151
東北大学金属材料研究所 松枝宏明、遠山貴己、前川禎通	

56.  $\pi$  接合を含む超伝導量子ビットの理論..... 154  
 東北大学金属材料研究所 山下太郎、高橋三郎、前川禎通
57. 超伝導複合体 d-dot の相互作用..... 157  
 大阪府立大学工学研究科数理工学分野 加藤 勝、平山昌樹  
 東北大学金属材料研究所 小山富男  
 日本原子力研究所計算技術推進センター 町田昌彦  
 大阪府立大学工学研究科電子物理工学分野 石田武和
58. バナジウム酸化物のスピン軌道秩序相におけるホールの運動..... 160  
 東北大学大学院理学研究科物理学専攻 石原純夫
59. 超伝導微細系の数値シミュレーション..... 162  
 大阪府立大学大学院工学研究科数理工学分野 末松久孝、加藤 勝  
 日本原子力研究所計算技術推進センター 町田昌彦  
 東北大学金属材料研究所 小山富男  
 大阪府立大学大学院工学研究科電子物理工学分野 石田武和
60. ナノ超伝導複合体における自発半量子磁束構造と磁束制御..... 164  
 大阪府立大学工学研究科数理工学分野 赤穂雅之、加藤 勝  
 日本原子力研究所計算技術推進センター 町田昌彦  
 東北大学金属材料研究所 小山富男  
 大阪府立大学工学研究科電子物理工学分野 石田武和
61. Strongly Correlated Electron Systems..... 166  
 Departamento de Fisica Universidad National de Rosario, Argentina  
 Jose A. Riera  
 IMR, Tohoku University Sadamichi Maekawa
62. 分子動力学シミュレーションによる Cu 原子拡散機構の検討..... 168  
 東北大学金属材料研究所 佐々木文子、Tang Zeng、永井康介、  
 長谷川雅幸
63. 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..... 173  
 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



64. First-Principles Calculation of Positronium in Solid..... 177  
IMR, Tohoku University Z. Tang, Y. Nagai, K. Inoue and M. Hasegawa
65. 反復法による蛍光X線ホログラムからの原子像の再構成..... 179  
東北大学金属材料研究所 高橋幸生、松原英一郎
66. 第一原理手法による反射率差スペクトルの理論計算..... 182  
東北大学金属材料研究所 森 貴洋、森村俊晴、花田 貴  
東北大学学際科学国際高等研究センター 八百隆文  
千葉大学理学部 中山隆史
67. Spin-Accumulation Effects in Metallic Nanoparticles..... 184  
IMR, Tohoku University Franck Ernult, K. Yakushiji, S. Mitani and  
K. Takanashi
68. 融液内三次元非定常熱対流を考慮した CZ 炉総合熱解析手法の構築・・ 189  
東北大学多元物質科学研究所 水戸光将、塚田隆夫  
早稲田大学各務記念材料技術研究所 島村清史、一ノ瀬昇  
東北大学金属材料研究所 宍戸統悦
69. The Current-Carrying Capacity and Thermal Stability Investigations of the High  
Temperature Superconducting  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  Composites Cooled by Liquid  
Helium or Hydrogen..... 193  
Russian Research Center "Kurchatov Institute", Russia V.R. Romanovskiy
70. プルトニウム酸化物の不定比組成における欠陥構造評価..... 194  
東北大学金属材料研究所 小無健司, 川添良幸, 松井秀樹  
CRC ソリューションズ 源 聡  
サイクル機構 加藤正人
71. 自己組織化単分子膜による電界効果トランジスタのキャリア数制御..... 196  
東北大学金属材料研究所 下谷秀和

## II. 原著論文

<2002 年>

1. Quasiparticle Excitations in Multi-layer Cuprate Superconductors..... 199  
Physica C, 378-381 (2002) pp.333-336  
M. Mori, T. Tohyama and S. Maekawa
2. Electronic States and Superconductivity in Multilayer High-Tc Cuprates... 203  
Phys. Rev. B., 66 (2002) pp.0645021-0645027  
M. Mori, T. Tohyama and S. Maekawa

<2004 年>

1. First-Principles Study of the Electronic Structures of Icosahedral  $Ti_N(N=13,19,43,55)$  Clusters..... 210  
J. Chem. Phys., 120[18] (2004) pp. 8463-8468  
Shan-Ying Wang, Jing-Zhi Yu, Hiroshi Mizuseki, Jia-An Yan,  
Yoshiyuki Kawazoe and Chong-Yu Wang
2. Thermodynamic Properties of the Cu-Au System Using a Face-Centered-Cubic Lattice Model with a Renormalized Potential..... 216  
J. Chem. Phys., 120[19] (2004) pp.9297-9301  
Ryoji Sahara, Kaoru Ohno, Hiroshi Kubo and Yoshiyuki Kawazoe
3. An Orbital-dependent Correlation Energy Functional in Density-functional Theory for the Study of Strongly-correlated Electronic Systems..... 221  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1402-1410  
Hiroshi Yasuhara, Masahiko Higuchi, Soh Ishii, Kenta Hongo and Yoshiyuki Kawazoe
4. *Ab Initio* Study of Hydrogen Storage in Hydrogen Hydrate Clathrates..... 230  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1452-1454  
Marcel H. F. Sluiter, Hitoshi Adachi, Rodion V. Belosludov,  
Vladimir R. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

5. Numerical Study on LiCaAlF<sub>6</sub> Czochralski Crystal Growth····· 233  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1515-1521  
Zhong Zeng, Jingqiu Chen, Hiroshi Mizuseki, Hiroki Sato,  
Kiyoshi Shimamura, Kyoko Ichinoseki, Tsuguo Fukuda and  
Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Oscillatory Thermocapillary Convection in Liquid Bridge under  
Microgravity····· 244  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp. 1522-1527  
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Jingqiu Chen, Kyoko Ichinoseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Stability of Copper Atoms Embedded in Sodium-Chloride Crystals····· 246  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1450-1451  
Miou Furuya, Soh Ishii, Yoshio Takahashi, Shin-ichiro Nagasaka,  
Takehisa Yoshinari, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
  
8. Growth and Magic Behavior of Metal Encapsulated Silicon Clusters····· 248  
Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1429-1432  
Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. A Lead-free High-T<sub>c</sub> Ferroelectric BaTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub>: A First-principles Study····· 252  
Appl. Phys. Lett., 84[24] (2004) pp.4917-4919  
Umesh Waghmare, Marcel H. F. Sluiter, Teiichi Kimura, Takashi Goto and  
Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Predictions of Novel Nanostructures of Silicon by Metal Encapsulation··· 255  
Comput. Mater. Sci., 30 (2004) pp.260-268  
Vijay Kumar
  
11. Current-Voltage Characteristics of Molecular Devices at Low Bias····· 264  
Chin. Phys. Lett., 21[7] (2004) pp.1247-1250  
Liao Yun-Xing, Chen Hao, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

12. Ferromagnetism and Piezomagnetic Behavior in Mn-Doped Germanium Nanotubes..... 268  
 Phys. Rev. B, 69 (2004) pp.2334061-2334064  
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Phase Diagram of Single-Wall Carbon Nanotube Crystals under Hydrostatic Pressure..... 272  
 Phys. Rev. B, 69 (2004) pp.22411101-22411111  
 Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Hydrogen Interaction on Rhodium Clusters..... 283  
 Mater. Trans., 45[8] (2004) pp.2587-2589  
 Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Nanoswitch Based on Nanotubes: Bent-Nanotubes Transport..... 286  
 Inter. J. Nanoscience, 3[1-2] (2004) pp.131-136  
 A. A. Farajian, B. I. Yakobson, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
16. Dynamical Criteria for Cs Ion Insertion and Adsorption at Cap and Stem of Carbon Nanotubes: *Ab Initio* Study and Comparison with Experiment..... 292  
 J. Phys. Chem. B., 108[40] (2004) pp.15529-15535  
 Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Goo-Hwan Jeong, Hiroshi Mizuseki, Takamichi Hirata, Rikizo Hatakeyama and Yoshiyuki Kawazoe
  
17. Design Proposal of Light Emitting Diode in Vacuum Ultraviolet Based on Perovskite-Like Fluoride Crystals..... 299  
 Jpn. J. Appl. Phys., 43[9A/B] (2004) pp.L1140-L1143  
 Riadh El Ouenzerfi, Shingo Ono, Alex Quema, Masahiro Goto, Nobuhiko Sarukura, Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa and Tsuguo Fukuda
  
18. *GW* Calculation of a Carbon Oxide Molecule Using an All-Electron Mixed-Basis Approach..... 303  
 Mater. Trans., 45[5] (2004) pp.1411-1413  
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

19. Search for Perovskite-Type New Borides in the Sc-TM-B(TM=Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, and Ni) Systems..... 306  
 J. Alloys. Compd., 383 (2004) pp.294-297  
 T. Shishido, K. Kudou, T. Sasaki, S. Okada, J. Ye, K. Iizumi, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara, M. Tanaka, S. Kohiki, Y. Kawazoe, K. Nakajima and M. Oku
20. Molten Metal Flux Growth and Properties of CrSi<sub>2</sub>..... 310  
 J. Alloys. Compd., 383 (2004) pp.319-321  
 T. Shishido, S. Okada, Y. Ishizawa, K. Kudou, K. Iizumi, Y. Sawada, H. Horiuchi, K. Inaba, T. Sekiguchi, J. Ye, S. Miyashita, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara, M. Oku, K. Fujiwara, T. Ujihara, G. Sazaki, N. Usami, S. Kohiki, Y. Kawazoe and K. Nakajima
21. Surface Structures of Cerium Oxide Nanocrystalline Particles from the Size Dependence of the Lattice Parameters..... 313  
 Appl. Phys. Lett., 85[17] (2004) pp.3845-3847  
 S. Tsunekawa, S. Ito and Y. Kawazoe
22. Design of Wide-gap Fluoride Heterostructures for Deep Ultraviolet Optical Devices..... 316  
 J. Appl. Phys., 96[12] (2004) pp.7655-7659  
 Riadh El Ouenzerfi, Shingo Ono, Alex Quema, Masahiro Goto, Masahiro Sakai, Nobuhiko Sarukura, Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroki Sato, Dirk Ehrentraut, Akira Yoshikawa and Tsuguo Fukuda
23. Energetics and Local Spin Magnetic Moment of Single 3,4*d* Impurities Encapsulated in an Icosahedral Au<sub>12</sub> Cage..... 321  
 Phys. Rev. B, 70 (2004) pp.1654131-1654136  
 Shan-Ying Wang, Jing-Zhi Yu, Hiroshi Mizuseki, Qiang Sun, Chong-Yu Wang and Yoshiyuki Kawazoe
24. Electronic Structures of the TTTA Molecular Crystal..... 327  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 29[8] (2004) pp.3719-3722  
 Miou Furuya, Kaoru Ohno, Jun Takeda and Yoshiyuki Kawazoe

25. Dielectric Function of  $(\text{CdSe})_{13}$  Clusters..... 331  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 29[8] (2004) pp.3723-3725  
 Yoshifumi Noguchi, Kaoru Ohno, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe,  
 Yurii Barnakov and Atsuo Kasuya
26. Dynamics on Electronic Excitation in Chemical Reaction..... 334  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 29[8] (2004) pp.3727-3729  
 Takahiro Sawada, Jian Wu, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
27. Intermixing Tendencies in Garnets: Pyrope and Grossular..... 337  
 Phys. Rev. B, 70[18] (2004) pp.1841201-1841204  
 Marcel H. F. Sluiter, Victor Vinograd and Yoshiyuki Kawazoe
28. Nonicosahedral Growth and Magnetic Behavior of Rhodium Clusters..... 341  
 Phys. Rev. B, 70[19] (2004) pp.1954131-1954137  
 Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
29. Water Adsorption on Ti-doped Silicon Clusters..... 348  
 Phys. Rev. B, 70[19] (2004) pp.1934021-1934024  
 Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
30. Double Ionization Energy Spectra of Small Alkali-metal Clusters..... 352  
 Science and Technology of Advanced Materials, 5 (2004) pp.663-665  
 Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
31. *Ab initio* Study on Geometrical Structures of the TTTA Molecular Crystal • 355  
 Science and Technology of Advanced Materials, 5 (2004) pp.689-692  
 Miou Furuya, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
32. All-electron Calculations on  $(\text{MgO})_n$  Cluster ( $n=1-10$ ) with Tohoku University  
 Mixed-Basis Program TOMBO..... 359  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 29 (2004) pp.15-18  
 Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

33. Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for the Carbon Atom..... 363  
 J. Chem. Phys., 121[15] (2004) pp.7144-7147  
 Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Yasuhara,  
 M. D. Towler and R. J. Needs
34. *Ab initio* Determination of Total-Energy Surfaces for Distortions of  
 Ferroelectric Perovskite Oxides..... 367  
 Jpn. J. Appl. Phys., 43[9B] (2004) pp.6785-6792  
 Takatoshi Hashimoto, Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Mizuseki,  
 Yoshiyuki Kawazoe, Atsushi Sasaki and Yoshiaki Ikeda
35. Metastability of A Gold Nanoring: Density-functional Calculations..... 375  
 Phys. Rev. B, 70 (2004) pp.2454111-2454115  
 Q. Sun, Q. Wang, P. Jena, R. Note, J-Z. Yu and Y. Kawazoe
36. Antiferromagnetic Coupling Driven by Bond Length Contraction near the  
 $Ga_{1-x}Mn_xN$  Film Surface..... 380  
 Phys. Rev. Lett., 93[15] (2004) pp.1555011-1555014  
 Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
37. Carrier-mediated Ferromagnetism in N Codoped  $(Zn,Mn)O$  (1010) Thin  
 Films..... 384  
 Phys. Rev. B, 70 (2004) pp. 0524081-0524084  
 Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
38. Electron Transport Through Heterocyclic Molecule: *Ab Initio* Molecular Orbital  
 Theory..... 388  
 Phys. Lett. A, 326 (2004) pp.412-416  
 W.W. Cheng, Y.X. Liao, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
39. Absolute Value of *GW* Quasiparticle Energies of a Methane Using an  
 All-electron Mixed-basis  
 Approach..... 393  
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., 29[8] (2004) pp.3695-3697  
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

40. Simulation of a Chemical Reaction,  $2\text{LiH} \rightarrow \text{Li}_2 + \text{H}_2$ , Driven by Doubly  
Excitation..... 396  
Sci. Tech. Adv. Mater., 5 (2004) pp.609-611  
Takahiro Sawada, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
41. Fractional Flux Periodicity in Doped Carbon Nanotubes..... 399  
Phys. Rev. B, 70 (2004) pp.2334061-2334064  
K. Sasaki, S. Murakami and R. Saito
42. Fractional Flux Periodicity in Tori Composed of Square Lattice..... 403  
Prog. Theor. Phys., 111[6] (2004) pp.763-780  
Ken-ichi Sasaki, Yoshiyuki Kawazoe and Riichiro Saito
43. Fractional Flux Periodicity of a Twisted Planar Square Lattice..... 421  
Phys. Lett. A, 329 (2004) pp.148-154  
K. Sasaki, Y. Kawazoe and R. Saito
44. Characteristic Behavior of Toroidal Carbon Nanotubes  
— Kinematics of Persistent Currents — ..... 428  
Prog. Theor. Phys., 112[3] (2004) pp.369-382  
Ken-ichi Sasaki and Yoshiyuki Kawazoe
45. Re-parameterization Invariance in Fractional Flux Periodicity..... 442  
J. Phys. Soc. Jpn., 73[12] (2004) pp.3231-3234  
Shuichi Murakami, Ken-ichi Sasaki and Riichiro Saito
46. Electronic Structure and Optical Properties of the Co-Doped Anatase  $\text{TiO}_2$   
Studied from First Principles..... 446  
Phys. Rev. B, 69[12] (2004) pp.1252191-1252196  
Hongming Weng, Xiaoping Yang, Jinming Dong, H. Mizuseki, M. Kawasaki  
and Y. Kawazoe



47. Boron-Carbon Atomic Ratio Dependence on the Hardness and Oxidation Resistance of Perovskite-Type solid Solution  
 $\text{ScRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$  ..... 452  
 J. Alloys. Compd., 375 (2004) pp.217-220  
 Toetsu Shishido, Jinhua Ye, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Kiyokata Iizumi, Masaoki Oku, Yoshio Ishizawa, Akira Yoshikawa, Masahiko Tanaka, Akiko Nomura, Takamasa Sugawara, Kazuo Obara, Tadaaki Amano, Shuji Oishi, Naoki Kamegashira, Yoshiyuki Kawazoe, Shigemi Kohiki and Kazuo Nakajima
48. Origin of Spontaneous Electric Dipoles in Homonuclear Niobium Clusters ..... 456  
 Phys. Rev. Lett., 93[24] (2004) pp.2461051-2461054  
 Kristopher E. Andersen, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Warren E. Pickett
49. Structure and Electronic Properties of Metal Di-(4-thiophenyl)-Porphyrin • 460  
 Molecular Simulation, 30[13-15] (2004) pp.929-933  
 Y. Kikuchi, R. V. Belosludov, H. Baba, A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
50. Numerical Studies of Wave Pattern in an Oxide Melt in the Czochralski Crystal Growth ..... 465  
 J. Cryst. Growth, 265 (2004) pp.505-517  
 C.J. Jing, T. Tsukada, M. Hozawa, K. Shimamura, N. Ichinose and T. Shishido
51. Vortex State of Nano-Scaled Superconducting Complex Structures (d-dot) ..... 478  
 Physica C, 412-414 (2004) pp. 544-547  
 Masayuki Ako, Masahiko Machida, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato
52. Finite Element Method for Bogoliubov-de Gennes Equation: Application to Nano-Structure Superconductor ..... 482  
 Physica C, 412-414 (2004) pp. 548-551  
 Hisataka Suematsu, Masahiko Machida, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato

53. Control of Carrier Density by Self-Assembled Monolayers in Organic Field-Effect Transistors..... 486  
 Nature Materials, 3[5] (2004) pp.317-322  
 S. Kobayashi, T. Nishikawa, T. Takenobu, S. Mori, T. Shimoda, T. Mitani, H. Shimotani, N. Yoshimoto, S. Ogawa and Y. Iwasa
54. Structure of Magnetic Flux in Nano-scaled Superconductores..... 492  
 J. Magn. Magn. Mater., 272-276 (2004) pp.171-172  
 Masaru Kato, Masayuki Ako, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida
55. Ginzburg-Landau Calculations of D-wave Superconducting Dot in S-wave Superconducting Matrix..... 494  
 Physica C, 412-414 (2004) pp.352-357  
 Masaru Kato, Masayuki Ako, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida
56. Inverse Tunnel Magnetoresistance Associated with Coulomb Staircases in Micro-fabricated Granular Systems..... 500  
 J. Magn. Magn. Mater., 272-276 (2004) pp.e1091-e1093  
 K. Yamane, K. Yakushiji, F. Ernult, M. Matsuura, S. Mitani, K. Takanashi, H. Fujimori
57. Orbital Wave and Its Observation in Orbital-ordered Titanates and Vanadates..... 503  
 Phys. Rev. B, 69 (2004) pp.0751181-0751189  
 Sumio Ishihara
58. Interplay of Electron-phonon Interaction and Electron Correlation in High-temperature Superconductivity..... 512  
 Phys. Rev. B, 69 (2004) pp.14452001-14452013  
 Sumio Ishihara
59. Doping Dependence of Spectral Function in Hole- and Electron-Doped High-T<sub>c</sub> Cuprates..... 525  
 Physica C, 412-414 (2004) pp139-142  
 T. Tohyama

60. Asymmetry of the Electronic States in Hole- and Electron-Doped Cuprates:  
Exact Diagonalization Study of the  $t$ - $t'$ - $t''$ - $J$  Model..... 529  
Phys. Rev. B, 70[17] (2004) pp.17451701-17451712  
T. Tohyama
61. Enhancement of Pairing in a Boson-Fermion Model for Coupled Ladders • 541  
Phys. Rev. B, 70[14] (2004) pp.1445191-1445197  
J. A. Riera

<2005 年>

1. TiO<sub>2</sub> (rutile) Doped with Double Impurities for Fabricating Spintronic  
Devices-A Combinatorial Computational Approach..... 548  
Meas. Sci. Technol, 16 (2005) pp.242-247  
P. Murugan, R.V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Nishimatsu, T. Fukumura,  
M. Kawasaki and Y. Kawazoe
2. First-principles Study of Ferromagnetic Coupling in Zn<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>Te Thin  
Film..... 554  
J. Appl. Phys., 97 (2005) pp.0439041-0439046  
Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
3. Nonlinear Charging and Transport Times in Doped Nanotubes Junctions •• 560  
Phys. Soc. Jpn., 74[2] (2005) pp.515-518  
Keivan Esfarjani, Amir A. Farajian, Yoshiyuki Kawazoe and Siu Tat Chui
4. Atomic Structures and Magnetic Behavior of Small Ruthenium Clusters •• 564  
Mater. Trans., 46[2] (2005) pp.159-162  
Young-Cho Bae, Hiroki Osanai, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
5. Prediction of Site Preference and Phase Stability of Transition Metal Based  
Frank-Kasper Phases..... 568  
The Science of Complex Alloy Phases (2005) pp.409-436  
Marcel H.F. Sluiter, Alain Pasturel, Yoshiyuki Kawazoe

6. Electron Transport Through Molecular Wire: Effect of Isomery..... 595  
 Physica E, 25 (2005) pp.643-646  
 W.W. Cheng, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
7. Effect of Time-reversal Symmetric Gauge Fields on the Groundstate Properties  
 of Carbon Nanotubes and Tori  
 Persistent Currents in Twisted Tori and Local Energy Gap in Deformed  
 Tubes..... 599  
 Phys. Stat. Sol. B., 242[2] (2005) pp.203-210  
 Ken-ichi Sasaki and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Local Energy Gap in Deformed Carbon Nanotubes..... 607  
 Prog. Theor. Phys., 113[3] (2005) pp.463-480  
 Ken-ichi Sasaki, Yoshiyuki Kawazoe and Riichiro Saito
  
9. Design of a Very Thin Direct-band-gap Semiconductor Nanotube of  
 Germanium with Metal Encapsulation..... 625  
 Phys. Rev. B., 71[7] (2005) pp.0753121-0753125  
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Growth Behavior of Metal-doped Silicon Clusters  
 $\text{Si}_n\text{M}$  (M=Ti, Zr, Hf; n=8-16) ..... 630  
 Phys. Rev. B., 71[7] (2005) pp.07542301-07542312  
 Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. Atomic and Electronic Structures of Neutral and Cation  $\text{Sn}_n$  (n=2-20) Clusters:  
 A Comparative Theoretical Study with Different Exchange-Correlation  
 Functionals..... 642  
 Phys. Rev. B., 71[3] (2005) pp.03540101-03540110  
 Chiranjib Majumder, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Hysteretic Current-Voltage Characteristics and Resistance Switching at  
 an Epitaxial Oxide Schottky Junction  $\text{SrRuO}_3/\text{SrTi}_{0.99}\text{Nb}_{0.01}\text{O}_3$ ..... 652  
 Appl. Phys. Lett., 86[1] (2005) pp.0121071-0121073  
 T. Fujii, M. Kawasaki, A. Sawa, H. Akoh, Y. Kawazoe, and Y. Tokura

13. Electronic and Transport Properties of Doped Organic Molecules for Molecular Wire Applications ..... 655  
 Jpn. J. Appl. Phys., 44[4B] (2005) pp.2823-2825  
 Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hidetoshi Baba, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Irradiation-Induced Vacancy and Cu Aggregations in Fe-Cu Model Alloys of Reactor Pressure Vessel Steels: State-of-the-Art Positron Annihilation Spectroscopy ..... 658  
 Philos. Mag., 85[4-7] (2005) pp.467-478  
 M. Hasegawa, Z. Tang, Y. Nagai, T. Chiba, E. Kuramoto and M. Takenaka
  
15. Self-Energy Correction to Momentum-Density Distribution of Positron-Electron Pairs ..... 670  
 Phys. Rev. Lett., 94[10] (2005) pp.106421-106424  
 Z. Tang, Y. Nagai, K. Inoue, T. Toyama, T. Chiba, M. Saito and M. Hasegawa
  
16. Enhanced Spin Accumulation and Novel Magnetotransport in Nanoparticles ..... 674  
 Nature Materials, 4 (2005) pp. 57-61  
 Kay Yakushiji, Franck Ernult, Hiroshi Imamura, Kazutaka Yamane, Seiji Mitani, Koki Takanashi, Saburo Takahashi, Sadamichi Maekawa and Hiroyasu Fujimori

### III. 国際会議発表論文

<2003 年>

1. Absolute Value of GW Quasiparticle Energies of a Methane Using an All-Electron Mixed-Basis Approach..... 679  
Proceedings of the Symposia of IUMRS-ICAM  
Yokohama, Japan (2003.10.8-13) pp.3695-3697  
Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
2. Electronic Structures of the TTTA Molecular Crystal..... 682  
Proceedings of the Symposia of IUMRS-ICAM  
Yokohama, Japan (2003.10.8-13) pp.3719-3722  
Miou Furuya, Kaoru Ohno, Jun Takeda and Yoshiyuki Kawazoe
3. Dielectric Function of (CdSe)<sub>13</sub> Clusters..... 686  
Proceedings of the Symposia of IUMRS-ICAM  
Yokohama, Japan (2003.10.8-13) pp.3723-3725  
Yoshifumi Noguchi, Kaoru Ohno, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe,  
Yurii Barnakov and Atsuo Kasuya
4. Dynamics on Electronic Excitation in Chemical Reaction..... 689  
Proceedings of the Symposia of IUMRS-ICAM  
Yokohama, Japan (2003.10.8-13) pp.3727-3729  
Takahiro Sawada, Jian Wu, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
5. Predictions of Novel Nanostructures of Silicon by Metal Encapsulation... 692  
Proceedings of the International Conference on Materials for Advanced  
Technologies (ICMAT 2003) and  
IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2003):  
Theory, Modeling and Simulation of Materials for Advanced Technologies  
Singapore (2003.12.7-12) pp.260-268  
Vijay Kumar

<2004 年>

1. Structure and Electronic Properties of Metal Di-(4-thiophenyl)-Porphyrin • 701  
Joint Conference of International Conference of Molecular Simulation (ICMS)  
and Computational Science Workshop 2004 (CSW2004)  
Tsukuba, Japan (2004.1.13-15) pp.929-933  
Y. Kikuchi, R. V. Belosludov, H. Baba, A. A. Farajian, H. Mizuseki  
and Y. Kawazoe
  
2. Theoretical Approach for Supramolecular Devices Based on Phthalocyanine  
Dimer..... 706  
The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.E/ P.03  
Hiroshi Mizuseki, Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
3. Theoretical Study of Supramolecular Enamel Wire Based on Cyclodextrin and  
Conducting Polymer..... 706  
The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.E/ P II .05  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
  
4. Genetic Algorithm Approach for Nanoscale Conducting Wires..... 706  
The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.H/P.18  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
5. Electronic Transport through Bent Carbon Nanotube Heterojunction for  
Nano-Sensors..... 707  
The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.I/ P II .32  
Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

6. Quantitative Estimation of the Order-Disorder Phase Transition Temperature of Ni<sub>3</sub>Al Using a Face Centered Cubic Lattice Model with a Renormalized Potential..... 707  
 The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
 Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.H/ P.55  
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Theoretical Study on Junction of Metal Porphyrin Oligomer for Molecular Nanoelectronics..... 709  
 The European Materials Research Society'04 (E-MRS)  
 Strasbourg, France (2004.5.24-29) No.G/P I .03  
 Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kikuchi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Advanced *Ab Initio* Simulations Applied to Nanotechnology..... 708  
 The 3rd International Conference on Computational Modeling and Simulation of Materials (CIMTEC)  
 Acireale (CT), Italy (2004.5.30-6.4) No.A-1:IL01 (Invited Talk)  
 Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Mizuseki
  
9. *Ab Initio* MO Study of Charged P<sub>6</sub> and their Silicon Analogues: Stability and Aromaticity..... 709  
 16th International Conference on Phosphorus Chemistry  
 Birmingham, UK (2004.7.4-9) p.18 No.0P-002  
 Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Spin-Accumulation Effect on Spin-Dependent Single-Electron Tunneling in Ferromagnetic Nanoparticles..... 710  
 5th International Symposium on Metallic Multilayers (MML '04)  
 Boulder, Colorado, USA (2004.7.7-11) H-4  
 K. Yakushiji, F. Ernult, S. Mitani, K. Takanashi and H. Fujimori



11. Theoretical Study of Polarons and Self-Trapped Excited States in One-Dimensional  $C_{60}$  Crystal ······ 711  
 Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
 Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.27  
 V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh
  
12. Realization of Molecular and Atomic Interconnection for Molecular Electronics:Theoretical Aspects ······ 712  
 Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
 Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.28  
 R.V. Belosludov, A. A. Farajian, Y. Kikuchi, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
13. Ultimate *Ab Initio* Calculations to Predict New Materials Expected to be Used in Nanotechnology ······ 713  
 Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
 Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.40 (Invited Talk)  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Novel Properties of Matter at the Nanoscale in Mixed Systems ······ 714  
 Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
 Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.45  
 Vijay Kumar
  
15. Diffusion Monte Carlo Study on  $TM@Si_n$  (TM=Ti, Cr;n=5-16) ······ 715  
 Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
 Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.48  
 Ryo Maezono, Kenta Hongo, Hiroaki Kawamura and Vijay Kumar,  
 Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

16. Ultra-Fast Designing of Functional Materials for Molecular Devices by First Principles and Genetic Algorithm Approaches..... 716  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.52  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
  
17. First Principles Calculations of Optical Absorption Spectra of Atoms in the Vacuum and Crystals..... 717  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.55  
Kaoru Ohno, Miou Furuya, Yoshifumi Noguchi, Soh Ishii and Yoshiyuki Kawazoe
  
18. Design for UV-Cut Materials Made of Novel Silicon Oligomers..... 718  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.61  
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
  
19. Kinetic Role of Surfactants in Nanowire Formation on Si(100)..... 719  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.65  
Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang, En-Ge Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Masamichi Naitoh and Satoshi Nishigaki
  
20. First Principles Studies of Magnesium Oxide Clusters by Parallelized Tohoku University Mixed-Basis Program TOMBO..... 720  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.78 No.G14  
Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

21. Dynamic and Thermodynamic Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate at Different Cage Occupation..... 721  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.103 No.E5  
Talgat M. Inerbaev, Vladimir R. Belosludov, Rodion V. Belosludov  
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
22. *Ab initio* Molecular Dynamics Study of Cs-Ion Insertion and Adsorption at Cap and Stem of Carbon Nanotubes..... 722  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.108 No.A11  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
23. A First Principles Study of Hardness in Perovskite-Type Rare Earth Rhodium Borides and Carbides..... 723  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.152 No.D19  
Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
24. Modelling of the Structure and Vibrational Properties of LDA, HDA, and VHDA Amorphous Ices..... 724  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16) p.158 No.G9  
O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov and  
Y. Kawazoe
25. *Ab Initio* Study of Small ZnO Clusters..... 725  
Abstracts of Second Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-2"  
Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16)  
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

26. Spin-Dependent Transport through Doped Porphyrin Molecular Bridges •• 726  
Abstracts of 20th General Conference Condensed Matter Division EPS  
Prague, Czech Rep. (2004.7.19-23) p.33 No.S1X21  
A. A. Farajian, R. V. Belosludov, Y. Kikuchi, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. Non-linear Electron Transport in Weakly-Coupled Disordered Semiconductor  
Superlattices ••••• 726  
Abstracts of 20th General Conference Condensed Matter Division EPS  
Prague, Czech Rep. (2004.7.19-23) p.176 No.S3X30  
Olga Pupysheva, Alexey Dmitriev, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
28. New Materials Design by Quantum Mechanical Computer Simulation  
-Fundamentally New Materials and Devices Based on Atomic and Molecular  
Assembly-••••• 727  
Proceedings of the 3rd Advanced Science Institute the Japan Society for the  
Promotion of Science  
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2004.7.26-31) No.III-19 (Invited Talk)  
Yoshiyuki Kawazoe
29. Numerical Studies of Wave Pattern on a Melt in the CZ Crystal Growth of  
Oxide ••••• 741  
14th International Conference on Crystal Growth  
Grenoble, France (2004.8.9-13) p.39  
C.J. Jing, M. Mito, T. Tsukada, M. Hozawa, K. Shimamura, N. Ichinose  
and T. Shishido
30. Calculation of Field Emission Current from Pure and Doped Carbon  
Nanotubes ••••• 742  
Abstracts of Kyoto Joint Symposium on Materials Science and Engineering for  
the 21th Century  
Kyoto, Japan (2004.8.18-20) p.47 No.09-J  
M. Khazaei, A. A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

31. First Principles Calculation of Hyperfine Parameters for Si Structure in Presence of Defects..... 743  
 Abstracts of Kyoto Joint Symposium on Materials Science and Engineering for the 21th Century  
 Kyoto, Japan (2004.8.18-20) p.83 No45-J  
 Mohammad Saeed Bahramy, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
32. *Ab Initio* Study of Growth Behaviour of Cu Nano-Cluster..... 744  
 Abstracts of Kyoto Joint Symposium on Materials Science and Engineering for the 21th Century  
 Kyoto, Japan (2004.8.18-20) p.92 No.54-J  
 M. Itoh, V. Kumar and Y. Kawazoe
33. Chloride Diffusivity of Sprayed Mortar in Wet Mix System..... 745  
 Proceedings of the 29th Conference on Our World in Concrete & Structures  
 Singapore (2004.8.25-26) pp.449-454  
 R. Sakurada, K. Hirata, J. Ikeda, K. Maruyama, T. Shimomura and Y. Kawazoe
34. Kinematics of Persistent Currents in Carbon Tube and Torus Geometries... 751  
 X X VIII International Conference of Theoretical Physics  
 Electron Correlations in Nano and Macrosystems (Invited)  
 Ustron, Poland (2004.9.2-7)  
 Ken-ichi Sasaki
35. Basic Study on Recovery Technique of Unhydrated Cement Grains from Waste Fresh Concrete..... 752  
 Proceedings of RILEM International Symposium on Environment-Conscious Materials and Systems for Sustainable Development  
 Koriyama, Japan (2004.9.6-7) pp.117-126  
 Ryoji Sakurada, Kyu-ichi Maruyama, Masanori Higuchi and Yoshiyuki Kawazoe

36. Novel Core-Cage Structures and Ultra-Stable Behavior on Nanoparticles of II-VI Compound Semiconductors..... 762  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.A-I-56  
A. Kasuya, Y. Noda, K. Tohji, Vijay Kumar, R. Belosludov and Y. Kawazoe
37. Growth Behaviours and Electronic Structures of Na and Cu Nano-Clusters: Hund's Rule and the Role of sp-d Hybridization..... 763  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.A-I-77  
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
38. Permanent Electric Dipoles in Homonuclear Clusters..... 764  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.A-I-78  
Vijay Kumar, Kristopher E. Andersen, Yoshiyuki Kawazoe and Warren E. Pickett
39. Magnetism in Supported Palladium Clusters: Designing Novel Catalysts from *ab initio* Simulations..... 765  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.A-III-13  
P. Murugan, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
40. Cluster Assembled Direct Band Gap Semiconducting Nanotube of Germanium with Metal Encapsulation..... 766  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.B-VIII-13  
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

41. Ultraviolet and Blue Luminescent Si Nanoparticles..... 767  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10) P.B-VIII-25  
Beata Macherzynska, Marius Macherzynski, Andriy Dmitruk,  
Sergiy Mamykin, Volodymyr Romanyk, Noriaki Ohuchi, Motohiro Takeda,  
Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Atsuo Kasuya
42. Design of Novel Supported Catalysts from First Principle Calculations... 768  
Abstracts of X II International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters  
Nanjing, China (2004.9.6-10)  
P. Murugan, V. Kumar and Y. Kawazoe
43. Genetic Algorithm Approach to Functional Molecules for Nanoscale Devices..... 769  
Abstracts of the 2004 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2004)  
Tokyo, Japan (2004.9.15-17) pp.594-595 No.P8-4  
Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
44. Electronic and Transport Properties of Molecular Wires: Theoretical Aspects for Realization of Nanoscale Interconnection..... 771  
Abstracts of the 2004 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2004)  
Tokyo, Japan (2004.9.15-17) pp.842-843 No.F-7-2  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Yoshiyuki Kikuchi, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
45. Ideal Interfacial Strength Between Vanadium and Oxide Ceramics..... 773  
Proceeding of 2nd International Conference on Multiscale materials Modeling  
University of California, Los Angeles (2004.10.11-15) p.135-137  
M. Satou, K. Abe, N. Kioussis and N. Ghoniem

46. Theoretical Approach for Transport Properties of Molecular Electronics Based on Binuclear Phthalocyanine..... 776  
 Abstracts of the Transport Phenomena in Micro and Nanodevices  
 Island of Hawaii, USA (2004.10.17-21) p.34  
 Hiroshi Mizuseki, Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
47. Evolutionary Approach to Functional Oligomers for Nanoscale Devices•• 777  
 Abstracts of the 1st Conference on Advanced Nanotechnology:Research, Applications, and Policy  
 Washington, DC, USA (2004.10.22-24) p.23  
 Hiroshi Mizuseki, Nubuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
48. Prediction of Giant Macroscopic Polarization in  $\text{PbVO}_3$  and  $\text{BiCoO}_3$ ..... 778  
 The 7th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations  
 Tamkang University, Taiwan (2004.11.1-3) p.112  
 Y. Uratani, T. Shishidou, F. Ishii and T. Oguchi
49. Ultimate *ab initio* Study to Predict New Materials in Nanoscale..... 779  
 Proceedings of The 2nd International Symposium on Nanomanufacturing (ISNM2004)  
 Daejeon, Korea (2004.11.3-5) pp.87-92 (Invited Talk)  
 Yoshiyuki Kawazoe, Marcel Sluiter, Hitoshi Adachi, Hiroshi Mizuseki, Kenta Hongo, Hiroshi Yasuhara and Vijay Kumar
50. Computational Molecular Evolution: Screening to Survey Appropriate Molecules for Molecular Devices..... 785  
 Abstracts of International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.55 No.P1-21  
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe



51. Combinatorial Approach on Planar Phthalocyanine Oligomers for Nanoscale Devices..... 785  
 Abstracts of International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides,  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.55 No.P1-22  
 Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
52. Doping Effects on Electronic Transport through Gold-Polythiophene-Gold Systems..... 786  
 Abstracts of International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.58 No.P1-28  
 A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
53. Large Scale Computer Simulation Environment on Distributed Supercomputers..... 786  
 Connected by Nano Technology Research Network with ITBL System  
 Abstracts of International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.73 No.P2-21  
 Kyoko Ichinoseki, Marcel H.F. Sluiter, Yoshiyuki Kawazoe, Hideaki Takahashi, Hitoshi Adachi and Hiroshi Yamaguchi
54. Excitonic Effect on Optical Response in One-Dimensional Two-Band Hubbard Model..... 787  
 International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.88 No.P3-18  
 Hiroaki Matsueda, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

55. Electron Sequential Tunneling in Disordered Multiple-Quantum-Well Structures..... 787  
 Abstracts of International Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides  
 Sendai, Japan (2004.11.22-24) p.93 No.P3-28  
 Olga V. Pupysheva, Alexey V. Dmitriev, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
56. Quantum Mechanical Computations to be able to Predict New Materials in Nanotechnology..... 788  
 Abstracts of MRS Fall Meeting 2004  
 Boston, USA (2004.11.29-12.3) p.848 (Invited Talk)  
 Y. Kawazoe and H. Mizuseki
57. A General-Purpose Approach for Calculating Transport in Contact-Molecule-Contact Systems: Application to Polythiophene-Based Nanodevices..... 789  
 Abstracts of The 6th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2004)  
 Kobe, Japan (2004.12.15-17) pp.92-93 No.S5-4  
 A.A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
58. Interaction of Single-walled Carbon Nanotubes with Alkylamines: *Ab initio* Study..... 791  
 Abstracts of the 6th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2004)  
 Kobe, Japan (2004.12.15-17) pp.246-247 No.PB-14  
 Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Hitoshi Nejo, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
59. Theoretical Study of Nanoscale Interconnects: Electronic and Transport Properties of Atomic and Molecular Wires..... 793  
 Abstracts of the 6th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2004)  
 Kobe, Japan (2004.12.15-17) pp.274-275 No.PB-28  
 R. V. Belosludov, A. A. Farajian. H. Baba, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

60. Electronic Structure and Transport Properties of Molecular Electronics Based on Binuclear Phthalocyanine..... 795  
Abstracts of the 6th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2004)  
Kobe, Japan (2004. 12.15-17) pp.284-285 No.PB-33  
Hiroshi Mizuseki, Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

<2005 年>

1. Theoretical Approach for Transport Properties of Porphyrin and Phthalocyanine Oligomers..... 797  
Molecular-Scale Electronics VII  
San Diego, California, USA (2005.1.23-26)  
Hiroshi Mizuseki, Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
2. Electronic and Transport Properties of Atomic and Molecular Wires: Theoretical Aspects for Realization of Smart Nanoscale Interconnects..... 798  
Molecular-Scale Electronics VII  
San Diego, California, USA (2005.1.23-26) Poster No.24  
Rodion Belosludov, Amir Farajian, Hidetoshi Baba, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
3. Understanding of the Reflectance Difference Spectroscopy of the GaNAs(001)-(2x4) Growth Surfaces..... 799  
32nd Conference on the Physics and Chemistry of Semiconductor Interfaces (PCSI-32)  
Bozeman, Montana, USA (2005.1.23-27)  
Takahiro Mori, Takashi Hanada, Toshiharu Morimura, Takafumi Yao and Takashi Nakayama

4. UV-Absorption Spectral Property of Novel Silicon Oligomers: An *ab Initio* Study..... 800  
International Conference on Organic Photonics and Electronics 2005 &  
8th International Conference on Organic Nonlinear Optics  
Sendai & Matsushima, Japan (2005.3.7-11)  
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
  
5. Origin of Electric Dipole Moments in Free Niobium Clusters..... 802  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.194 Session B25  
Kristopher Andersen, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Warren Pickett
  
6. Theoretical Investigation of Noncollinear Magnetism for Mn<sub>5</sub> and Mn<sub>6</sub>... 802  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.456 Session H42  
Tsuguo Morisato, Shiv Khanna and Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Hydrogenated Silicon Fullerenes and Endohedral Dopings..... 803  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.873 Session N26  
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for the Atomic Systems..... 803  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.974 Session P32  
Kenta Hongo, Takayuki Oyamada, Ryo Maezono, Yoshiyuki Kawazoe,  
Hiroshi Yasuhara, M.D. Towler and R.J. Needs
  
9. Thinnest Insulating and Semiconducting Nanotubes of SiO<sub>x</sub> (x = 1 and 2)• 804  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.1348 Session W25  
Abhishek Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Remarks on Edge States with the Aharonov-Bohm Flux..... 804  
March Meeting 2005 (Bulletin of the American Physical Society)  
Los Angeles, USA (2005.3.21-25) p.1420 Session X25  
Ken-ichi Sasaki, Yoshiyuki Kawazoe, Riichiro Saito and Syuichi Murakami

11. Genetic Algorithm Approach for Design of Molecular Devices..... 805  
Computational Science Workshop 2005 (CSW2005) Algorithm and Software  
Developments in Nano-Scale Simulations  
Tsukuba, Japan (2005.3.22-23) p.56 No.P3  
N. Igarashi, H. Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and  
Y. Kawazoe
  
12. A General-Purpose Program for Computing Transport in  
Contact-Molecule-Contact Systems: Application to Polythiophene-Based  
Nanodevices..... 806  
Computational Science Workshop 2005 (CSW2005) Algorithm and Software  
Developments in Nano-Scale Simulations  
Tsukuba, Japan (2005.3.22-23) p.90 No.P20  
A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
  
13. Modeling of Electronic Structure and Charge Transport in DNA and Its Sodium  
Salts from the First Principles..... 807  
Computational Science Workshop 2005 (CSW2005) Algorithm and Software  
Developments in Nano-Scale Simulations  
Tsukuba, Japan (2005.3.22-23) p.96 No.P23  
Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov,  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

#### IV. 紀要等

1. ボロン化合物を中心とする超高硬度化合物の探索…………… 809  
新素材設計開発施設共同利用研究報告書 (2004.6) pp.148-149  
奥 正興、穴戸統悦、我妻和明、孫 強、川添良幸、中嶋一雄
2. 没入型 3 次元仮想現実体感システム CAVE と AVS を用いた  
ナノテク用新材料の電子状態の可視化…………… 811  
社団法人 情報処理学会 研究報告 (2004.7.31) pp.109-114  
林 亮子、堀井 洋、井口 寧、川添良幸、堀口 進
3. Samba3.0 による Windows PC 用ファイルサーバー、プリントサーバーの  
構築…………… 817  
技術部 技術研究報告書、第 21 号 (2005.3) pp.69-73  
五十嵐伸昭、川添良幸
4. スーパーコンピューター結合とそれを活用した超大規模シミュレーション計算  
によるナノテクノロジー研究者用ネットワークの実現…………… 822  
技術部 技術研究報告書、第 21 号 (2005.3) pp.79-85  
一関京子、マーセル・スライター、川添良幸、高橋英明、  
豊岡雅人、安達 斉、山口 裕
5. ナノサイズ・センシングカプセルの新規開発と医療応用 量子力学計算による  
医療用新物質探索と物性予測…………… 829  
厚生労働科学研究費補助金 萌芽的先端医療技術推進研究事業  
ナノサイズ・センシングカプセルの新規開発と医療応用 (H14-ナノ-010)  
平成 14 年～平成 16 年度総合研究報告書 (2005.3) pp.20-24  
川添良幸、水関博志
6. クラスターの固相－固相構造転移の研究…………… 834  
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 (2005.6) pp.84-85  
川添良幸、池庄司民夫
7. ナノクラスター機能活用新物質開発研究…………… 836  
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 (2005.6) pp.208-211  
川添良幸

## V. 予稿集・研究会・講演等

### 予稿集

<2004 年>

1. 第一原理計算の進展とナノテクノロジー用新物質設計…………… 841  
INSAM シンポジウム 2003 (招待講演)  
非線形科学におけるハイパフォーマンスコンピューティングシステム  
ナノシミュレーション:物質設計を目指して  
広島大学理学部E002 (2004.1.10) pp.31-78  
川添良幸
2. 量子力学による精密計算に基づいたナノ先端材料の開発…………… 855  
清華大学 日経 BP 社 ナノテクフォーラム(招待講演)  
北京、中国(2004. 4.15)  
川添良幸
3. 新規ケイ素オリゴマーとケイ素ベンゼン…………… 856  
ナノ学会第 2 回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.51  
高橋まさえ、川添良幸
4. Smallest Magic Caged Clusters of Si, Ge, Sn and Pb by Encapsulation of  
Transition Metal Atom…………… 857  
ナノ学会第 2 回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.62  
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
5. 金属原子内包シリコンクラスターの *GW* 計算…………… 858  
ナノ学会第 2 回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.63  
石井 聡、大野かおる、Vijay Kumar、川添良幸
6. 量子モンテカルロ法による  $\text{Cr@Si}_{12}$  クラスターの研究…………… 859  
ナノ学会第 2 回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.64  
本郷研太、前園 涼、Vijay Kumar、川添良幸、安原 洋

7. ロジウムクラスターの非稠密構造と磁性..... 860  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.68  
裴 栄造、長内弘喜、Vijay Kumar、川添良幸
8. 第一原理計算による Cu クラスターの系統的大規模研究..... 861  
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
9. CdSe ナノクリスタルを用いた HER2 発現乳癌細胞の蛍光イメージング... 862  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.104  
多田 寛、佐竹正延、亀井 尚、武田元博、中島護雄、川添良幸、  
粕谷厚生、大内憲明
10. II-VI族半導体ナノ粒子の安定構造..... 863  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.114  
粕谷厚生、V. Romanyuk、田路和幸、V. Kumar、R. Belosludov、川添良幸
11. Fullerenelike Atomic Structures of CdSe Clusters with a Core..... 864  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.115  
Vijay Kumar, Rodion V. Belosludov, Y. Kawazoe and A. Kasuya
12. 金属フタロシアニンの電気的特性の理論的解析..... 865  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.116  
馬場英年、水関博志、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、菊地良幸、  
川添良幸
13. *Ab initio* Molecular Dynamics Study of Cs-ion Insertion and Adsorption at  
Cap and Stem of Carbon Nanotubes..... 866  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.149  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe



14. 第一原理計算によるペロブスカイト型化合物  $\text{ScRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$  の硬度解析・・・ 867  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.151  
佐原亮二、宍戸統悦、Vijay Kumar、川添良幸
15. 第一原理  $T$ -matrix 理論によるダブルイオン化エネルギー計算・・・・・・・ 868  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.170  
野口良史、石井 聡、大野かおる
16. 酸化セリウムナノ結晶の格子定数のサイズ依存と粒子構造・・・・・・・ 869  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.187  
恒川 信、伊藤 俊、川添良幸
17. Molecular Wire Interconnection for Molecular Electronics:  
Theoretical Study・・・・・・・ 870  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.195  
R. V. Belosludov, A. A. Farajian, Y. Kikuchi, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
18. 第一原理計算および遺伝的アルゴリズムによる分子デバイス用材料の  
高速設計・・・・・・・ 871  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.196  
水関博志、五十嵐伸昭、R. V. Belosludov、A. A. Farajian、O. V. Pupysheva、  
川添良幸
19. *Ab Initio* Study of ZnO Nanotube・・・・・・・ 872  
ナノ学会第2回講演予稿集  
東京 (2004.5.9-11) p.197  
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

20. 超大規模材料設計シミュレーション計算支援と  
遠隔スーパーコンピューター連成実験..... 873  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) 第一部  
川添良幸
21. *Ab Initio* Study of MgO Clusters..... 874  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.16  
Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
22. Semiconducting Nanotubes of  $\text{SiO}_x$  ( $x=1,2$ )..... 875  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.17  
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
23. *Ab initio* Molecular Dynamics Study of Cs-Ion Insertion and Adsorption at  
Cap and Stem of Carbon Nanotubes..... 876  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.18  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
24. ペロブスカイト型強誘電体の全エネルギー表面の第一原理計算..... 877  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.19  
橋本孝俊、西松 毅、水関博志、川添良幸、佐々木 淳、池田義秋
25. 第一原理計算による銅クラスターの幾何学構造と電子状態..... 878  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.20  
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸

26. 金属フタロシアニンの電気的特性の理論的解析..... 879  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.21  
馬場英年、水関博志、Rodion V. Belosludov、 Amir A. Farajian、  
菊地良幸、川添良幸
27. DAST を超える 2 次非線形光学特性をもつ新有機イオン結晶の  
計算設計..... 880  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.22  
斎藤繁喜、五十嵐伸昭、王 山鷹、高橋まさえ、水関博志、川添良幸
28. Samba による Windows PC 用ファイルサーバ、プリントサーバの構築..... 800  
第 107 回東北大学金属材料研究所春季講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.5.13-14) p.61  
五十嵐伸昭、川添良幸
29. Field Emission from Doped Capped Carbon Nanotubes:  
*An Ab-Initio Study*..... 800  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.152 No.2P-49  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
30. *Ab initio* Study of the Effect of Organic Amines on the Debundling of  
Single-Walled Carbon Nanotubes..... 883  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.24 No.1-16  
Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Hitoshi Nejo, Hiroshi Mizuseki and  
Yoshiyuki Kawazoe
31. Charge Transfer, Energetics and Transport Characteristics of Doped Nanotube  
Bundles..... 884  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.22 No.1-14  
A.A. Farajian, H. Nejo, M. Khazaei, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

32. Local Energy Gap in Deformed Carbon Nanotubes ..... 885  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.89 No.1P-41  
K. Sasaki, Y. Kawazoe and R. Saito
33. Metallic and Direct Band Gap Semiconducting Nanotubes of Germanium with Metal Encapsulation ..... 886  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.95 No.1P-47  
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
34. Ultra-Stable (CdSe)<sub>33</sub> and (CdSe)<sub>34</sub> Nano-Particles in II - VI Compound ..... 887  
第 27 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
東京 (2004.7.28-30) p.211 No.3P-53  
A. Kasuya, R. Sivamohan, Y. Barnakov, I. Dmitruk, V. Romanyuk, K. Tohji,  
V. Kumar, R. Belosludov and Y. Kawazoe
35. 金属フタロシアニン 2 量体の電気的特性についての理論解析 ..... 888  
第 65 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集  
東北学院大学 (2004.9.1-4) p.1110  
馬場英年、水関博志、Rodion. V. Belosludov、 Amir. A. Farajian、川添良幸
36. 第一原理計算による分子被覆導線の電気伝導特性 ..... 888  
第 65 回応用物理学会学術講演会 講演予稿集  
東北学院大学(2004.9.1-4) p.1190  
Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
37. シミュレーションによるナノテクノロジー用新デバイス設計 ..... 889  
第 35 回応用物理学会スクール A  
「物質創成や現象の予測につながるシミュレーションの現状」  
東北学院大学 泉キャンパス (2004.9.3) pp.59-68  
川添良幸
38. 導電性新規ケイ素ポリマー ..... 899  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.744  
高橋まさえ、川添良幸

39. 分子性結晶 DAST の全電子密度分布と分子間静電エネルギー…………… 900  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.774  
斎藤繁喜、五十嵐伸昭、水関博志、高橋まさえ、川添良幸
40. 磁場下でのナノ超伝導板の準粒子構造Ⅲ…………… 901  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.587  
末松久孝、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和
41. ナノ超伝導複合体(d-dot)間の相互作用…………… 902  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.556  
加藤 勝、平山昌樹、町田昌彦、小山富男、石田武和
42. ナノ超伝導複合体(d-dot)間の相互作用Ⅱ…………… 903  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.696  
平山昌樹、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和
43. 密度行列繰り込み群法によるハロゲン架橋 Ni 錯体の  
光吸収スペクトルの計算…………… 904  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.682  
松枝宏明、遠山貴己、前川禎通
44. パイ接合を含む超伝導リングにおけるジョセフソン効果…………… 905  
日本物理学会 2004 年秋季大会  
青森大学 (2004.9.12-15) p.391  
山下太郎、谷川和男、高橋三郎、前川禎通
45. 核融合ブランケットシステムのための耐熱絶縁被覆の研究  
—バナジウムと酸化物セラミックスの理想界面強度—…………… 906  
日本原子力学会 2004 年秋の大会  
京都大学 (2004.9.15-17) p.162  
佐藤 学、阿部勝憲、N. Kioussis、S. Sharaf、N. M. Ghoniem、V. Gupta

46. 量子力学に基づく水素吸蔵材料の設計と物性予測…………… 907  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.169 (基調講演)  
川添良幸、Rodion Belosludov、Marcel Sluiter、折茂慎一、中森裕子
47. シリコンナノチューブの構造と物性…………… 908  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.361  
川添良幸、Vijay Kumar and Abhishek Kumar
48. Morphology of Nanotube Crystals…………… 908  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.361  
M.H.F. Sluiter and Y. Kawazoe
49. 第一原理計算によるルテニウムクラスターの原子構造と磁性…………… 908  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.361  
裊 栄造、長内弘喜、Vijay Kumar、川添良幸
50. 第一原理計算による Na, Cu クラスターの成長挙動の違いに関する  
系統的研究…………… 909  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.362  
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
51. 第一原理計算による  $RRh_3B_xC_{1-x}$  ( $R=La, Y, Sc$ ) 系ペロブスカイト型化合物の  
機械的特性…………… 909  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会秋期大会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30)  
佐原亮二、宍戸統悦、Vijay Kumar、川添良幸
52. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる FCC および HCP 金属の  
熱力学諸特性…………… 910  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会秋期大会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30)  
佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸

53. 鉄中の銅の拡散ダイナミクスの分子動力学シミュレーション..... 910  
2004 年秋期第 135 回大会 日本金属学会秋期大会講演概要  
秋田大学(2004.9.28-30) p.515  
佐々木文子、唐 政、永井康介、長谷川雅幸
54. Evaluation of Ideal Strength of Metal/Ceramics Interface using First-Principles  
Calculation..... 911  
第 8 回先進エネルギーシステム材料と核分裂・核融合炉工学に関する  
日中シンポジウム  
東北大学 (2004.10.4-6)  
M. Satou, K. Abe
55. Novel Silicon Oligomer and Silicon Benzene: An *ab initio* Study..... 912  
有機金属討論会第 51 回大会  
学習院大学 (2004.10.22-23) pp.94-95  
高橋まさえ、川添良幸
56. 第一原理計算と STM 観測による Si(313)12x1 再構成表面の  
原子構造の研究..... 914  
第 9 回ケイ素化学協会シンポジウム  
東京 (2004.10.28-29) P.107  
高橋まさえ、Vijay Kumar、川添良幸、Weisheng Yang、櫻井利夫
57. MHD 圧力損失低減のための絶縁セラミックスとバナジウム合金の接合に  
関する研究..... 915  
プラズマ・核融合学会第 21 回年会  
静岡 (2004.11.23-26) p.104  
佐藤 学、澤田智世、阿部勝憲
58. 金属ポルフィリン、フタロシアニンの導電性の理論解析..... 916  
第 108 回金属材料研究所秋季講演大会  
東北大学金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.22  
馬場英年、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸

59. 第一原理計算とSTM観測によるSi(313)12x1再構成表面の  
原子構造の研究..... 917  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.21  
高橋まさえ、Vijay Kumar、川添良幸、Weisheng Yang、櫻井利夫
60. Growth Behaviors and Electronic Structures of Na and Cu Nano-Clusters:  
Hund's Rule and the Role of sp-d Hybridization..... 918  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.25  
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
61. イオン対分子性結晶を構築する分子間力の第一原理計算..... 919  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.24  
斎藤繁喜、高橋まさえ、水関博志、川添良幸
62. 第一原理計算によるRRh<sub>3</sub>BおよびRRh<sub>3</sub>C (R=La, Y, Sc)系  
ペロブスカイト型化合物の機械的特性..... 920  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.23  
佐原亮二、宍戸統悦、Vijay Kumar、川添良幸
63. Cluster Assembled Direct Band Gap Semiconducting Nanotube of Germanium  
with Metal Encapsulation..... 921  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.26  
Abhishek K. Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
64. Permanent Electric Dipoles in Homonuclear Clusters..... 922  
第108回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.27  
Vijay Kumar, Kristopher E. Andersen, Yoshiyuki Kawazoe and  
Warren E. Pickett



65. Design of Novel Supported Catalysts from First Principle Calculations··· 923  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.28  
 P. Murugan, V. Kumar and Y. Kawazoe
66. Multiscale Modeling of DNA Conductance····· 924  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.30  
 O. V. Pupyshva, A.A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and  
 Y. Kawazoe
67. Dynamics and Equation of State of Hydrogen Clathrate Hydrate as a Function  
 of Cage Occupation····· 925  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.31  
 Talgat M. Inerbaev, Vladimir R. Belosludov, Rodion V. Belosludov,  
 Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
68. Electronic and Band Structures of Carbon Nanotube Doped by Organic  
 Molecules····· 926  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.32  
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Taishi Takenobu,  
 Yoshihiro Iwasa and Yoshiyuki Kawazoe
69. First Principles Studies of Zinc Oxide Clusters····· 927  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.33  
 Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
70. Fabrication of Self-Assembled Nanodots at Arbitrary Locations by Spatially  
 Controlled Implant Source Growth····· 928  
 第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
 東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.42  
 Ryan Buckmaster, Takashi Handa, Meoung-whan Cho, Yoshiyuki Kawazoe,  
 Takafumi Yao, Nobuaki Urushihara, and Akira Yamamoto

71. 第一原理計算と遺伝的アルゴリズムによるナノデバイスの設計…………… 929  
第 108 回金属材料研究所秋季講演会  
東北大金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.85  
五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、川添良幸、水関博志
72. 自己格子間原子機構による鉄中の銅原子の拡散のシミュレーション…………… 930  
第 108 回金属材料研究所講演会  
東北大学金属材料研究所 (2004.11.25-26) p.34  
佐々木文子、唐 政、永井康介、長谷川雅幸
73. シミュレーションによる分子デバイス用材料の設計開発…………… 931  
2004 年度 第 4 回 多元物質科学研究所研究発表会 講演予稿集  
東北大学多元物質科学研究所 (2004.12.3) p.33  
水関博志、馬場英年、Rodion V. Belosludov、 Amir A. Farajian、  
Olga. V. Pupysheva、川添良幸
74. 自己格子間原子機構による鉄中の銅原子の  
分子動力学シミュレーション…………… 932  
第 28 回日本原子力学会東北支部研究交流会  
東北大学 (2004.12.10)  
佐々木文子、唐 政、永井康介、長谷川雅幸
75. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる  
Au-Cu 系計算状態図作製…………… 934  
合金状態図 第 172 委員会 第 8 回委員会 研究会  
大分 (2004.12.10-11)  
佐原亮二、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、川添良幸
76. 自己格子間原子機構による鉄中の銅原子の  
分子動力学シミュレーション…………… 937  
東北大学金属材料研究所研究会  
「軽水炉構造材料の特性劣化とその微視的機構」  
東北大学金属材料研究所 (2004.12.10-11)  
佐々木文子、唐 政、永井康介、長谷川雅幸

77. Conductivity of a Porphyrin and Phthalocyanine..... 938  
第2回 NAREGI 冬の学校  
山形 (2004.12.20-22)  
馬場英年、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸

<2005 年>

1. Application of a General Formalism for Calculating Field Emission of Nanostructures to Doped, Capped Nanotubes..... 939  
第28回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム  
名城大学、愛知 (2005.1.7-9) p.189 No.3P-36  
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
2. 第一原理計算によるペロブスカイト型化合物  $\text{ScRh}_3\text{B}_x$  の機械的特性..... 940  
第3回日本金属学会東北支部大会  
宮城工業高等専門学校 (2005.2.5) P.12  
佐原亮二、宍戸統悦、野村明子、工藤邦男、岡田 繁、Vijay Kumar、中嶋一雄、川添良幸
3. 第一原理計算によるナノスケールデバイス設計..... 941  
第3回日本金属学会東北支部大会  
宮城工業高等専門学校 (2005.2.5) P.13  
水関博志、馬場英年、五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、Olga. V. Pupysheva、川添良幸
4. 一次元金属性を示すアニオン性ポリシリコンの設計..... 942  
第3回日本金属学会東北支部大会  
宮城工業高等専門学校 (2005.2.5) P.18  
高橋まさえ、川添良幸
5. 金属クラスターの原子空孔..... 943  
第3回日本金属学会東北支部大会  
宮城工業高等専門学校 (2005.2.5) P.26  
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸

6. ポルフィリンおよびフタロシアニンオリゴマーの電気的特性についての理論解析..... 944  
 第3回日本金属学会東北支部大会  
 宮城工業高等専門学校 (2005.2.5) P.29  
 馬場英年、上原朋樹、R. V. Belosludov、A. A. Farajian、水関博志、川添良幸
  
7. ポルフィリン、フタロシアニン分子の電気的特性についての理論計算... 945  
 NAREGI ナノサイエンス実証研究 第3回公開シンポジウム  
 愛知 (2005.2.14-15) Poster No.1P02  
 馬場英年、上原朋樹、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
  
8. 全電子混合基底法第一原理プログラムの GRID 上での分散処理化とそのナノ材料設計..... 946  
 NAREGI ナノサイエンス実証研究 第3回公開シンポジウム  
 愛知 (2005.2.14-15) pp.86-89  
 川添良幸
  
9. Exitonic Effect on Optical Response in One-dimensional Two-band Hubbard Model..... 950  
 NAREGI ナノサイエンス実証研究 第3回公開シンポジウム  
 愛知 (2005.2.14-15) Poster No.1P12  
 H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa
  
10. First-Principles Nanomaterial Design for Application in Nanomedicine... 956  
 21st Century COE Program (2005.2.15) pp.52-53  
 Rodion Belosludov, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Katsuya and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. Theoretical Study of Molecular Devices: Electronic and Transport Properties..... 958  
 3rd International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE3)  
 東京 (2005.3.3-4) P.112  
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Frajian, Olga V. Pupysheva, and Yoshiyuki Kawazoe

12. *Ab initio* Study of Vacancy in Na Nano-clusters..... 959  
74th Kinken Workshop Materials Science School for Young Scientists  
宮城 (2005.3.3-5)  
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
13. Open Structures of *4d* Transition Metal Clusters..... 960  
74th Kinken Workshop Materials Science School for Young Scientists  
宮城 (2005.3.3-5)  
Young-Cho Bae
14. Controlling Edge State of Zigzag Carbon Nanotubes by the  
Aharonov-Bohm Flux..... 961  
74th Kinken Workshop Materials Science School for Young Scientists  
宮城 (2005.3.3-5) p.101  
Kenichi Sasaki
15. A First Principles Study of the Elastic Properties of Perovskite-Type  
Rare Earth Rhodium Borides and Carbides..... 963  
74th Kinken Workshop Materials Science School for Young Scientists  
宮城 (2005.3.3-5)  
R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar,  
K. Nakajima and Y. Kawazoe
16. Study of Advanced X-ray Fluorescence Holography Method..... 964  
文部科学省科学研究費・特例領域研究(B)  
局在量子構造に基づいた新しい材料機能創出技術の構築,  
第5回公開シンポジウム  
京都 (2005.5.3-5) p.93  
Yukio Takahashi, Eiichiro Matsubara, Toshiyuki Shima, Koki Takanashi,  
and Yoshiyuki Kawazoe

17. Design Proposal of Light Emitting Diode in Vacuum Ultraviolet Based on Perovskite-Like Fluoride Crystals..... 965  
International Symposium on Frontier in Materials design, Synthesis and Measurements(Creative Scientific Research on Collaboratory on Electron Correlations-Toward a New Research Network between Physics and Chemistry)  
Hyogo, Japan (2005.3.11-15) P.59  
S. Ono, H. Murakami, R.El Ouenzerfi, G. Diwa, A. Quema, N. Sarukura, T. Nishimatsu, N. Terakubo, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, H. Sato, D. Ehrentraut, A. Yoshikawa and T. Fukuda
18. Molecular Orbital Analysis for Nanoscale Devices: Electronic and Transport Properties..... 966  
International Symposium on Frontier in Materials design, Synthesis and Measurements(Creative Scientific Research on Collaboratory on Electron Correlations-Toward a New Research Network between Physics and Chemistry)  
Hyogo, Japan (2005.3.11-15) P.80  
Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Frajian, Olga V. Pupysheva and Yoshiyuki Kawazoe
19. 低温電子線照射された鉄中の銅原子拡散機構の分子動力学シミュレーション..... 967  
ワークショップ「材料科学における不安定性と微細構造」  
北海道大学電子科学研究所 (2005.3.16-18) p.0333-2  
佐々木文子、唐 政、永井康介、長谷川雅幸、蔵元英一
20. チタンクラスターイオンと窒素分子との衝突反応過程ータンデム型質量分析器による反応断面積測定と全電子混合基底による第一原理分子動力学シミュレーション..... 968  
日本物理学会第 60 回年次大会  
東京理科大学 (2005.3.24-27) p.887  
市橋正彦、半村 哲、Marcel Sluiter、川添良幸、近藤 保

21. トレハロース関連物質のテラヘルツスペクトルとその解析…………… 969  
日本物理学会第 60 回年次大会  
東京理科大学 (2005.3.24-27) p.718 No.26pYH-16  
高橋まさえ、川添良幸、石川陽一、伊藤弘昌
22. シリコンベースナノサイズ単分子磁石の理論計算…………… 970  
日本物理学会第 60 回年次大会  
東京理科大学 (2005.3.24-27) p.813 No.27aYK-7  
高橋まさえ、前園 涼、川添良幸
23. 磁性半導体中の磁気不純物準位と強磁性相互作用 I …………… 971  
日本物理学会第 60 回年次大会  
東京理科大学 (2005.3.24-27) p.629  
高橋三郎、谷川和男、市村雅彦、前川禎通、G. Baskaran
24. 磁性半導体中の磁気不純物準位と強磁性相互作用 II :  
軌道縮退の効果…………… 972  
日本物理学会第 60 回年次大会  
東京理科大学 (2005.3.24-27) p.630  
谷川和男、市村雅彦、高橋三郎、前川禎通、G. Baskaran
25. パイ接合を含む超伝導量子ビットの理論…………… 973  
日本物理学会 2005 年春季大会  
東京理科大学 (2005.3.26) p.652  
山下太郎、高橋三郎、前川禎通
26. 第一原理計算によるペロブスカイト型希土類ロジウムホウ化物の  
機械的特性…………… 974  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.435  
佐原亮二、宍戸統悦、野村明子、工藤邦男、岡田 繁、  
Vijay Kumar、中嶋一雄、川添良幸
27. 第一原理計算による  $\text{PuO}_{2-x}$  の酸素ポテンシャルの評価…………… 974  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.436  
小無健司、松井秀樹、川添良幸、源 聡、加藤正人

28. 量子モンテカルロ法による原子系列のフント則に関する解釈…………… 975  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.438  
小山田隆行、本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
29. 拡散量子モンテカルロ法によるシリコンクラスターの電子相関…………… 975  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.439  
川添良幸、本郷研太、安原 洋、前園 涼、Vijay Kumar
30. 第一原理計算によるナノデバイス用材料の導電性評価…………… 976  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.452  
水関博志、馬場英年、上原朋樹、五十嵐伸昭
31. 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  
界面方位依存性…………… 976  
2005 年春期第 136 回大会 日本金属学会講演概要  
横浜国立大学 (2005.3.29-31) p.361  
佐藤 学、小松孝行、垣江道人、阿部勝憲
32. 非線形光学のためのスチルバゾリウム-遷移金属型材料の設計…………… 977  
第 52 回応用物理学関係連合講演会  
埼玉大学 (2005.3.29-4.1) p.1253  
Talgat M. Inerbaev、水関博志、高橋まさえ、斎藤繁喜、  
Rodion V. Belosludov、川添良幸
33. 第一原理計算による分子被覆導線のドーピング効果の検討…………… 977  
第 52 回応用物理学関係連合講演会  
埼玉大学 (2005.3.29-4.1) p.1416  
Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸



## VI. 新聞記事等

### <2004 年>

1. 『量子力学による精密計算に基づいたナノ先端材料の開発』…………… 979  
SOHU.com (2004.3.24) 中国インターネットニュースより
2. 『日本IBM 東北大の研究を支援 UNIXサーバー無償供与』…………… 980  
日経産業新聞(2004.4.5)
3. 『ナノテクノロジー用材料設計— シリコンテクノロジーからナノテクノロジーへ  
シミュレーション計算による新物質設計』…………… 981  
IMR ニュース KINKEN, 44 (2004) SPRING & SUMMER, p.2  
川添良幸
4. 『サイヴァクス 模擬実験研究を受託—ナノ新材料の設計や評価』…………… 982  
日経産業新聞(2004.7.5)
5. 『ナノテクを計算・解析 —NPO と連携 サイヴァクスが受託事業』…………… 983  
日刊工業新聞 (2004.7.9)
6. 『Computer Modelling of New Materials』…………… 984  
about The Asian Consortium for Computational Materials Science  
ACCMS -2, Novosibirsk, Russia (2004.7.14-16)  
Science in Siberia, 30 (2004. 7) in Russian and English
7. 『半導体・FPD・ナノテク 東京で来月セミナー 熊本県』…………… 988  
日刊工業新聞 (2004.9.24)
8. 『キーワードは「科技」 NPOで地域おこし』…………… 989  
日刊工業新聞 (2004.12.27)

### <2005 年>

1. 『東北大学、蛍光ナノ粒子を用いた新しいガン診断法を開発。患者への  
負担を大幅軽減』…………… 990  
日経ナノテクノロジーニュース記事 (2005.2.28)

2. 『ナノ学会第3回大会プレビュー 発表件数300件、5月8日から仙台市で  
大規模に開催』…………… 992  
日経ナノテクノロジーニュース記事 (2005.4.15)
3. 『台湾の企業と共同研究 新型ディスプレイ開発へ』…………… 994  
河北新報 (2005.4.19)
4. 『東北大教授ら台湾企業と共同研究 新型ディスプレイ開発へ』…………… 995  
YAHOO! JAPAN NEWS (河北新報) (2005.4.19)

## VII. 雑誌等掲載解説記事

### <2004 年>

1. 『平成 15 年度後期客員教員 研究成果報告』…………… 997  
"新素材" 施設ニュース, No.26 (2004.7) P.4  
クマール・ヴィジェイ博士財団 Vijay Kumar
2. 『繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる計算状態図の  
絶対値算定』…………… 998  
まてりあ, 43[7] (2004.7.20) P.616 "はばたく"より  
佐原亮二
3. 『広がるナノシミュレーションの世界”ー計算材料学の発展ー』…………… 999  
週刊ナノテク, 1174 (2004.8.23) pp.12-13
4. 『Highest Level of Simulation to Predict Materials Properties!』…………… 1001  
Institute for Materials Research 2004, p.25  
計算材料学部門
5. 『Research Life in IMR』…………… 1002  
まてりあ, 43[8] (2004.8.20) p.697 "はばたく"より  
Zhong Zeng
6. 『電子構造研究のための多体論基盤』…………… 1003  
II 局所密度近似(LDA)を超える新しい計算手法の開発とその応用  
固体物理, 第 39 巻 第 11 号 (2004.11.15) pp.46-57  
安原 洋、本郷研太、川添良幸
7. 『量子モンテカルロ法による第一原理計算』…………… 1015  
固体物理, 第 39 巻 第 11 号 (2004.11) pp.75-86  
前園 涼
8. 『ナノテクは原子・分子設計から始まる 計算機シミュレーションを  
有効活用せよ』…………… 1027  
プレスジャーナル  
川添良幸

9. 『材料系欧文誌 Materials Transactions のインパクトファクター値に関する再考』…………… 1028  
 まてりあ, 43[12] (2004.12.20) p.1050 "談話室"より  
 川添良幸
  
10. 『東北は世界の未来ラボ』…………… 1029  
 日立 TO 技報, 第 10 号 (2004.12) pp.2-4 "巻頭言"より  
 川添良幸
  
11. 『PEOPLE in ISTU』…………… 1032  
 ISTU マガジン cultural café, 2004.Autumn, 6 (200412.8)
  
12. 『新規ケイ素オリゴマーとケイ素ベンゼン』…………… 1033  
 ナノ学会会報, 第 3 巻 第 1 号 (2004.12.31) pp.11-16
  
13. 『走査プローブ微細加工法による極微細電極の調整と高分子ナノワイヤの電気伝導度測定』…………… 1039  
 ナノ学会会報, 第 3 巻 第 1 号 (2004.12.31) pp.29-34  
 橋詰富博、藤森正成、平家誠嗣、石橋政義、下村武史、伊藤耕三、寺田康彦、三木一司、奈良 純、大野隆央、水関博志、川添良幸

<2005 年>

1. 『多元物質科学研究所研究発表会並びに素材高額研究奨励賞授賞式』…………… 1045  
 東北大学学報, No. 1614 (2005.1) p.15 "諸報"より
  
2. 『ナノテクは基礎科学、バイオ、化学などの融合技術  
 日本のナノテクは国際化により世界トップに』…………… 1046  
 週刊ナノテク, 第 1198 号 (2005.2.28) p.02  
 ピキエリ・ファビオ
  
3. 『平成 16 年度大阪大学総合技術研究会に参加して』…………… 1047  
 技術部ニュース, 第 44 号 (2005.3.30) pp.8-9 "見聞録"より  
 五十嵐伸昭

4. 『東北大学総合技術研究会が開催されました』…………… 1048  
技術部ニュース, 第 44 号 (2005.3.30) p.9"諸報"より

## VIII.表彰授与

1. 『ACCMS AWARD』受賞・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1049  
ACCMS (Asian Consortium on Computational Materials Science)  
Vijay Kumar (2004.7.15)
2. 『素材工学研究奨励賞』受賞・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1050  
「シミュレーションによる分子デバイス用材料の設計開発」  
水関博志 (2004.12.3)

## IX. その他

1. 中国 浙江大学教授によるセミナー(2005.1.26)..... 1051  
Prof. Yang Deren, Prof. Yu-Feng Yao\*, Prof. Chen Jizhong, Prof. Yan Mi  
Zhejiang University School of medicine, P. R. China
2. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員..... 1052
3. 計算材料学センター長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧・ 1053
4. 東北大学金属材料研究所構内図..... 1056
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図..... 1057