

2005 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

(2005 年 4 月～2006 年 3 月)

目次

巻頭言

I. 研究内容概要

1. Si₆アニオンクラスターの *ab initio* 量子化学計算…………… 1
東北大学金属材料研究所 高橋まさえ、川添良幸
2. 希土類ロジウムホウ化物の機械的特性に対する空孔および炭素の影響の理論解析…………… 6
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、小島秀伸、宍戸統悦、野村明子、中嶋一雄、川添良幸
Vijay Kumar 財団、産総研 Vijay Kumar
神奈川大学工学部 工藤邦男
国土舘大学工学部都市システム工学科 岡田 繁
3. First-Principles Design of Nanomaterials for Nanomedical Application…… 11
IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki, M. Philpott and Y. Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
V. Kumar
CIR, Tohoku University A. Kasuya
University of Minnesota Duluth, USA V. Nemykin
Institute of Inorganic Chemistry, Russia V. R. Belosludov
4. Theoretical Study of Acetylene Accommodation in Metal-Organic Microporous Materials…………… 13
IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
Dep. of Synthetic Chem. and Biol. Chem., Graduate School of Eng., Kyoto University R. Matsuda, R. Kitaura and S. Kitagawa

5. Dynamic and Thermodynamic Properties of Clathrate Hydrates Using the Accurate Atomistic Models 15
 Institute of Inorganic Chemistry, Russia V. R. Belosludov, O. S. Subbotin and D. S. Krupskii
 IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, T.M. Inerbaev and Y. Kawazoe
 RICS, National Institute of AIST T. Ikeshoji
 Center for Northeast Asia Studies, Tohoku University J. Kudoh

6. Origin and Temperature Dependence of the Electric Dipole Moment in Niobium Clusters 18
 Dep. of Phys., University of California, USA Kristopher E. Andersen and Warren E. Pickett
 Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
 Vijay Kumar
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

7. Cubic Magic Clusters of Rhodium Stabilized with Eight-Center Bonding: Magnetism and Growth 21
 CODEC Co. Ltd. Young-Cho Bae and Hiroki Osanai
 Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
 Vijay Kumar
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe

8. "Molecular Electronics", "Bioinorganic Materials" and "Quantum Dot Cages and Cores" 23
 IMR, Tohoku University Michael R. Philpott

9. First Principles Phase Diagram Calculation for the System $\text{NaNbO}_3\text{-KNbO}_3$ 32
 Ceramic Division, Mater. Sci. and Eng. Lab., National Inst. of Standards and Technology, USA B. P. Burton
 Theoretical Sci. Unit, J. Nehru Center for Adv. Sci. Res., India
 U.V. Waghmare
 IMR, Tohoku University T. Nishimatsu

10. "Molecular Dynamics Simulations of Effective Hamiltonians for Bulk and Ultra-Thin Ferroelectric Films", "Lead-Free Ferroelectrics"..... 34
Theoretical Sci. Unit, J. Nehru Center for Adv. Sci. Res., India
U.V. Waghmare
IMR, Tohoku University T. Nishimatsu

11. Geometries and Electronic Properties of Ta_n , Ta_nO and TaO_n ($n=1-3$) Clusters..... 35
IMR, Tohoku University Z.J. Wu and Y. Kawazoe
Key Lab. of Rare Earth Chem. and Phys., Changchun Inst. of Appl. Chem.,
China J. Meng

12. Effect of Sodium Counterions on the DNA Electronic Structure and Conductance..... 38
IMR, Tohoku University Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian,
Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

13. A General-Purpose Approach for Calculating Transport in Contact-Molecule-Contact Systems: TARABORD Implementation and Application to a Polythiophene-based Nanodevice..... 40
IMR, Tohoku University A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

14. Theoretical Investigation of Transport through a Gated Nanodevice..... 42
IMR, Tohoku University A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
Advanced Research Laboratory, Hitachi Ltd. T. Hashizume

15. *Ab Initio* Study of Structural and Bonding Stability of Mo-S Clusters..... 44
IMR, Tohoku University P. Murugan and Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
Vijay Kumar
Hitachi Maxell Ltd. Norio Ota

16. Report of *Ab Initio* Studies on Nanoclusters..... 49
IMR, Tohoku University Amit Jain

17. Theoretical Study of Nonlinear Optic Active Organic and Organometallic Compounds..... 51
IMR, Tohoku University Talgat M. Inerbaev
18. Pristine Semiconducting [110] Silicon Nanowires..... 56
IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
Vijay Kumar
19. Effects of Morphology and Doping on the Electronic and Structural Properties of Hydrogenated Silicon Nanowires..... 58
IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
Vijay Kumar
20. Thorium Encapsulated Caged Clusters of Germanium: Th@Ge_n,
n = 16, 18, and 20..... 60
IMR, Tohoku University Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
Vijay Kumar
21. The First-Principles Study of a Single Tetravalent Atom Doped Al₁₂ Cage in Anionic, Neutral, and Cationic States..... 61
IMR, Tohoku University G. Chen and Y. Kawazoe
22. Magneto-Optical Kerr Effects in Half-Metallic Ferromagnetic Transition Metal Chalcogenides in Zinc-Blende and Wurtzite Structures..... 74
IMR, Tohoku University Hongming Weng and Yoshiyuki Kawazoe
Department of Physics, Nanjing University, China Jinming Dong
23. Field Emission from Capped Carbon Nanotubes..... 76
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
24. Na ナノクラスターにおける原子空孔の安定性..... 82
東北大学金属材料研究所 伊藤正寛

25. 第一原理計算によるテラヘルツ周波数領域の物性解明…………… 82
 東北大学金属材料研究所 斎藤繁喜、Talgat M. Inerbaev、水関博志、
 五十嵐伸昭、野手竜之介、川添良幸
26. *Ab Initio* Study of Local Magnetic Moment Formation of Isolated Fe Impurity
 in Dilute Pd_{1-x}V_x Alloys…………… 85
 IMR, Tohoku University Mohammad Saeed Bahramy and
 Yoshiyuki Kawazoe
 Tata Institute of Fundamental Research, India S.N. Mishra
 TP & PE Division, Bhabha Atomic Research Center, India G.P. Das
27. Many-Body Effects in Transport Characteristics of Nanodevices…………… 87
 IMR, Tohoku University Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and
 Yoshiyuki Kawazoe
28. First Principles Calculation Study on Catalytic Reaction for Fuel Cells…………… 88
 IMR, Tohoku University Susumu Imai, Palanichamy Murugan and
 Yoshiyuki Kawazoe
 Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
 Vijay Kumar
 Development and Technol. Division, Hitachi Maxell Ltd. Norio Ota
29. 第一原理計算によるフェロセンワイヤーの導電性評価…………… 90
 東北大学金属材料研究所 上原朋樹、五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、
 Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
30. Pt-M 合金 (M = Ru, Sn) 上における CO 酸化に関する理論研究…………… 95
 東北大学金属材料研究所 岡 利昭、水関博志、川添良幸
31. 量子モンテカルロ法による Hund 則の研究…………… 98
 東北大学金属材料研究所 小山田隆行、丸山洋平、本郷研太、
 川添良幸、安原 洋
32. 14 族多価クラスターの安定構造の理論計算…………… 102
 東北大学金属材料研究所 菊地英樹、高橋まさえ、川添良幸

33. 第一原理計算によるペロブスカイト型希土類ホウ化物 $RERh_3B_x$ ($RE = Sc, Ce$)
の構造および機械的特性評価…………… 104
東北大学金属材料研究所 小島秀伸、佐原亮二、宍戸統悦、野村明子、
中嶋一雄、川添良幸
Dr. Vijay Kumar Foundation, India; RICS, National Institute of AIST
Vijay Kumar
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
34. 酸化インジウム電子状態に対するすず、酸素および空孔の影響…………… 107
東北大学金属材料研究所 平林亨一、佐原亮二、水関博志、川添良幸
東北大学多元物質科学研究所 中村 崇
35. $BaTiO_3$ における格子歪みによる強誘電性増強機構の第一原理計算…………… 108
東北大学金属材料研究所 橋本孝俊、西松 毅
36. 真空中および結晶中の原子の吸収スペクトルの第一原理計算…………… 113
横浜国立大学工学部 大野かおる、石井 聡、志賀圭一郎
東北大学金属材料研究所 川添良幸、佐原亮二、
スライター・マーセル、水関博志
山形大学理学部 高橋良雄、吉成武久、長坂慎一郎
37. 凝縮系中のナノ構造制御による機能発現…………… 117
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
山口大学 Venture Business Laboratory 趙 国軍、古賀健治
東北大学金属材料研究所 川添良幸
38. 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…………… 122
秋田工業高等専門学校環境都市工学科 桜田良治
University of Texas, M. D. Anderson Cancer Center, USA Tina Marie Briere
東北大学金属材料研究所 Abhishek Kumar Singh、川添良幸
39. コンピューターシミュレーションによる生体分子の構造安定性…………… 124
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

40. 蛍光プローブによるハイパーモバイル水の検出法の開発とアクトミオン
運動機構への応用..... 125
東北大学工学研究科 最上譲二
東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. Theoretical Studies on Energy Science and Environmental Science..... 127
Dep. of Phys., Virginia Commonwealth Univ., USA Q. Sun
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
42. First-Principles Studies on Low-Dimensional Diluted Magnetic
Semiconductors..... 128
Dep. of Phys., Virginia Commonwealth Univ., USA Qian Wang and
Qiang Sun
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
43. Finite-Temperature Magnetism of Tetragonal Iron..... 133
Inst. of Phys., Chinese Academy of Sciences, China Jian-Tao Wang and
Ding-Sheng Wang
IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
44. *Ab-Initio* Study of Molecule Transport Characteristics..... 134
Physics Dep., Fudan University, China F. Jiang, Y.X. Zhou and H. Chen
IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
45. Progress Report on *Ab Initio* Study of GaAs Clusters..... 136
National University of Singapore, Singapore Yuan Ping Feng
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
46. Estimation of Elastic Constants of TiC and VN Based on *Ab Initio*
Calculation..... 137
Kanto Polytechnic University Hiroshi Kubo
Dep. of Mater. Sci., Graduate School of Eng., Tohoku Univ. Susan Farjami
IMR, Tohoku University Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe

47. 光解離分光実験と密度汎関数計算による Cr_3^+ の構造研究..... 142
株式会社コンポン研究所 間嶋拓也
東京大学大学院理学部 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
48. 金属クラスターと分子との反応..... 143
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
49. 大規模第一原理計算手法の開発と強誘電体の物性予測..... 145
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
50. Theoretical Study of the Interaction between Aluminium and
Para-Methoxy-Phenylene-Vinylene Oligomer..... 146
Computing Tech. Res. and Development Division, National Electronics and
Computer Technol., Thailand Apirath Phusittrakool and Sornthep Vannarat
Nat. Metal and Mater. Tech. Center, Thailand Chanchana Thanachayanont
Dep. of Chem., Faculty of Science, Kasetsart University, Thailand
Songwut Suramitr and Supa Hannongbua
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
51. $4d$ 遷移金属クラスターの非稠密構造..... 149
株式会社コーデック 斐 栄造、長内弘喜
Vijay Kumar 財団, 産総研 Vijay Kumar
東北大学金属材料研究所 川添良幸
52. Interaction of Alkali Metals and Transition Metal Elements with the Si(001)
Surface (in progress) 151
Sch. of Math. & Phys. Sci., The Univ. of Newcastle, Australia M.W. Radny
University of Texas, M. D. Anderson Cancer Center, USA Tina Marie Briere
IMR, Tohoku University A. Kumar-Singh and Y. Kawazoe
53. 第一原理計算による $\text{Fe}@C_{60}$ の電子状態と磁性の研究..... 152
アクセルリス株式会社 森里嗣生
東北大学金属材料研究所 川添良幸

54. 第一原理計算による臭素終端シリコン表面の欠陥構造の研究..... 153
株式会社日立製作所 基礎研究所 諏訪雄二、橋詰富博
東北大学金属材料研究所 水関博志、川添良幸
55. 二次元モット絶縁体の光励起状態の対称性..... 155
東北大学金属材料研究所 遠山貴己
56. 銅酸化物高温超伝導物質における共鳴非弾性 X 線散乱の理論的研究・ 156
東北大学金属材料研究所 筒井健二、遠山貴己、前川禎通
57. 微小異方的超伝導体のシミュレーション..... 157
大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 加藤 勝
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 石田武和
58. d-dot の相互作用..... 161
大阪府立大学大学院工学研究科 平山昌樹、加藤 勝、石田武和
日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 町田昌彦
東北大学金属材料研究所 小山富男
59. 超伝導ネットワークの数値シミュレーション..... 166
大阪府立工業高等専門学校総合工学システム学科 佐藤 修
大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 加藤 勝
60. 超伝導微細系の数値シミュレーション..... 167
大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 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 石田武和
61. Computation of Annihilation Characteristics of Positronium in Silica..... 169
IMR, Tohoku University Z. Tang, K. Inoue, Y. Nagai, F. Sasaki and
M. Hasegawa

62. 第一原理計算によるセラミックスと遷移金属との接合界面の理想強度に関する研究..... 170
 東北大学大学院工学研究科 佐藤 学、垣江道人、阿部勝憲
 東北大学金属材料研究所 長谷川雅幸
63. Study of Kinetically Limited Growth of Pentacene Quinone on Si(111) .. 173
 IMR, Tohoku University Y. Fujikawa, A. Al-Mahboob, J.T. Sadowski and
 T. Sakurai
64. ウラン中間フッ化物の構造および基準振動の理論計算..... 178
 東北大学金属材料研究所 山村朝雄、吉田 裕、塩川佳伸
 日本原子力研究開発機構 門 一実、綱嶋康倫
65. 希ガス内包 C₆₀ の分子振動の理論研究..... 181
 東北大学金属材料研究所 下谷秀和
66. GaNAs(001) 成長表面に関する検討..... 182
 東北大学金属材料研究所 森 貴洋、小林元気、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. Characterization of Buckling of Nanotubes under Compression by
 Finite Element Analysis..... 184
 IFCAM, IMR, Tohoku University Deng Pan and Mingwei Chen
 Dep. of Aeronautics and Space Eng., Tohoku University Ning Hu and
 Hisao Fukunaga
68. 第一原理計算(VASP)を用いた金属ガラスおよび粒界における
 原子構造決定..... 189
 東北大学金属材料研究所、IFCAM 藤田武志
69. 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.. 191
 大阪府立大学大学院工学研究科 塚田隆夫
 物質・材料研究機構物質研究所 島村清史
 早稲田大学理工学部 一ノ瀬昇
 東北大学金属材料研究所 宍戸統悦

II. 原著論文

<2004 年>

1. Growth, Magic Behavior, and Electronic and Vibrational Properties of Cr-Doped Si Clusters..... 193
Phys. Rev. B, 70[24] (2004) pp.24543301-24543310
Hiroaki Kawamura, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

<2005 年>

1. Theoretical Study on Planar Anionic Polysilicon Chains and Cyclic Si₆ Anions with D_{6h} Symmetry..... 203
Organometallics, 24[10] (2005) pp.2433-2440
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
2. Stabilizing the Silicon Fullerene Si₂₀ by Thorium Encapsulation..... 211
Phys. Rev. B, 71[11] (2005) pp.1154291-1154296
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. Thermodynamic Properties of Transition Metals Using Face-Centered-Cubic Lattice Model with Renormalized Potentials..... 217
Mater. Trans., 46[6] (2005) pp.1127-1130
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
4. Highly Controlled Acetylene Accommodation in a Metal-Organic Microporous Material..... 221
Nature, 436[7048] (2005) pp.238-241
Ryotaro Matsuda, Ryo Kitaura, Susumu Kitagawa, Yoshiki Kubota, Rodion V. Belosludov, Tatsuo C. Kobayashi, Hirotoshi Sakamoto, Takashi Chiba, Masaki Takata, Yoshiyuki Kawazoe and Yoshimi Mita
5. Atomic Structures and Magnetism in Small MoS₂ and WS₂ Clusters..... 225
Phys. Rev. A, 71[6] (2005) pp.0632031-0632036
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota

6. Silica-Coating of Fluorescent Polystyrene Microspheres by a Modified Stöber Method and their Stability against Photo-bleaching 231
 e-Polymers, 52 (2005) pp.1-8
 Yoshio Kobayashi, Kiyoto Misawa, Masaki Kobayashi, Motohiro Takeda, Mikio Konno, Masanobu Satake, Yoshiyuki Kawazoe, Noriaki Ohuchi and Atsuo Kasuya

7. Erratum: Origin of Spontaneous Electric Dipoles in Homonuclear Niobium Clusters [Phys. Rev. Lett., 93, 246105 (2004)] 239
 Phys. Rev. Lett., 95[8] (2005) p.089901
 Kristopher E. Andersen, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Warren E. Pickett

8. Atomic-Scale Structure of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Solid Solutions 240
 Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials, 24-25 (2005) pp.523-526
 I. Yonenaga, M. Sakurai, M.H.F. Sluiter and Y. Kawazoe

9. First Principles Based Design and Experimental Evidence for a ZnO-Based Ferromagnet at Room Temperature 244
 Phys. Rev. Lett., 94[18] (2005) pp.1872041-1872044
 Marcel H. F. Sluiter, Y. Kawazoe, Parmanand Sharma, A. Inoue, A. R. Raju, C. Rout and U. V. Waghmare

10. Thorium Encapsulated Caged Clusters of Germanium:
 $\text{Th}@Ge_n$, $n = 16, 18,$ and 20 248
 J. Phys. Chem. B, 109[32] (2005) pp.15187-15189
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

11. Dynamic Ad-Dimer Twisting Assisted Nanowire Self-Assembly on Si(001) 251
 Phys. Rev. Lett., 94[22] (2005) pp.2261031-2261034
 Jian-Tao Wang, E. G. Wang, D. S. Wang, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, M. Naitoh and S. Nishigaki

12. Controlling Edge States of Zigzag Carbon Nanotubes by the Aharonov-Bohm Flux..... 255
Phys. Rev. B, 71[19] (2005) pp.1954011-1954015
K. Sasaki, S. Murakami, R. Saito and Y. Kawazoe

13. *Ab Initio* Study of Ferromagnetism in Ga_{1-x}Cr_xN Thin Films..... 260
Phys. Rev. B, 72[4] (2005) pp.0454351-0454356
Q. Wang, Q. Sun, P. Jena, J. Z. Yu, R. Note and Y. Kawazoe

14. Interactions of Uranium Atom with Tetraketone Complexes..... 266
Chem. Phys. Lett., 415 (2005) pp.243-245
Q. Sun, Q. Wang, Y. Shiokawa and Y. Kawazoe

15. Encapsulation of Halide Anions in Perhydrogenated Silicon Fullerene:
X⁻@Si₂₀H₂₀ (X = F, Cl, Br, I) 269
Chem. Phys. Lett., 406[4-6] (2005) pp.341-344
Fabio Pichierri, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

16. Band-Structure Design of Fluoride Complex Materials for Deep-Ultraviolet
Light-Emitting Diodes..... 273
Jpn. J. Appl. Phys., 44[10] (2005) pp.7285-7290
Shingo Ono, Riadh El Ouenzerfi, Alex Quema, Hidetoshi Murakami,
Nobuhiko Sarukura, Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki,
Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa and Tsuguo Fukuda

17. An *Ab Initio* Study of Single-Walled Nanotubes Bombarded with 50-150 eV
Cs⁺ Ions..... 279
Chem. Phys. Lett., 415 (2005) pp.34-39
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and
Yoshiyuki Kawazoe

18. GaN Nanodot Fabrication by Implant Source Growth..... 285
Microelectronics Journal, 36 (2005) pp.456-459
R. Buckmaster, J. H. Yoo, K. Shin, Y. Yao, T. Sekiguchi, M. Yokoyama,
T. Hanada, T. Goto, M. Cho, Y. Kawazoe and T. Yao

19. Invariance of Truncated Cluster Expansions for First-Principles Alloy Thermodynamics..... 289
 Phys. Rev. B, 71[21] (2005) pp.2122011-2122012
 Marcel H. F. Sluiter and Y. Kawazoe
20. Stoichiometric and Ultra-Stable Nanoparticles of II-VI Compound Semiconductors..... 291
 Eur. Phys. J. D,34 (2005) pp.39-41
 A. Kasuya, Y. Noda, I. Dmitruk, V. Romanyuk, Y. Barnakov, K. Tohji, V. Kumar, R. Belosludov, Y. Kawazoe and N. Ohuchi
21. Metal Encapsulated Nanotubes of Germanium with Metal Dependent Electronic Properties..... 294
 Eur. Phys. J. D,34 (2005) pp.295-298
 A. Kumar Singh, V. Kumar and Y. Kawazoe
22. First-Principles Study of the Onset of Noncollinearity in Mn_n Clusters: Magnetic Arrangements in Mn_5 and Mn_6 298
 Phys. Rev. B, 72[1] (2005) pp.0144351-0144354
 T. Morisato, S. N. Khanna and Y. Kawazoe
23. *Ab Initio* Study of Magnetism in Palladium Clusters Supported on (110) Surface of TiO_2 Rutile..... 302
 Int. J. Mod. Phys. B, 19 (2005) pp.2544-2549
 P. Murugan, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
24. Growth Behaviors and Electronic Structures of Na and Cu Nanoclusters: The Role of *sp-d* Hybridization..... 308
 Int. J. Mod. Phys. B, 19 (2005) pp.2421-2426
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
25. Evolution of the Electronic Structure of Be Clusters..... 314
 J. Chem. Phys., 123[7] (2005) pp.07432901-07432910
 V. Cerowski, B. K. Rao, S. N. Khanna, P. Jena, Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

26. Atomistic Structure and Strain Relaxation in Czochralski-Grown $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Bulk Alloys..... 324
 J. Mater. Sci. Mater. Electron., 16 (2005) pp.429-432
 I. Yonenaga, M. Sakurai, M. H. F. Sluiter, Y. Kawazoe and S. Muto
27. Cubic Magic Clusters of Rhodium Stabilized with Eight-Center Bonding: Magnetism and Growth..... 328
 Phys. Rev. B, 72[12] (2005) pp.1254271-1254276
 Young-Cho Bae, Vijay Kumar, Hiroki Osanai and Yoshiyuki Kawazoe
28. *ab initio* Study of Strain-Induced Ferroelectricity in SrTiO_3 334
 Jpn. J. Appl. Phys., 44[9B] (2005) pp.7134-7140
 Takatoshi Hashimoto, Takeshi Nishimatsu, Hiroshi Mizuseki,
 Yoshiyuki Kawazoe, Atsushi Sasaki and Yoshiaki Ikeda
29. Magnetic Coupling between Cr Atoms Doped at Bulk and Surface Sites of ZnO 341
 Appl. Phys. Lett., 87[16] (2005) pp.1625091-1625093
 Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
30. Field Emission Patterns from First-Principles Electronic Structures: Application to Pristine and Cesium-Doped Carbon Nanotubes..... 344
 Phys. Rev. Lett., 95[17] (2005) pp.1776021-1776024
 Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
31. Clustering of Ti on a C_{60} Surface and Its Effect on Hydrogen Storage..... 348
 J. Am. Chem. Soc., 127 (2005) pp.14582-14583
 Qiang Sun, Qian Wang, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe
32. Structure of the Thinnest Most Stable Semiconducting and Insulating Nanotubes of SiO_x ($x = 1,2$) 350
 Phys. Rev. B, 72[15] (2005) pp.1554221-1554225
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

33. *Ab Initio* Study of Molecule Transport Characteristics Based on Nonequilibrium Green's Function Theory..... 355
 Phys. Rev. B, 72[15] (2005) pp.15540801-15540810
 F. Jiang, Y. X. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
34. Dynamics and Nano-Clustering of Alkali Metals (Na, K) on the Si(1 1 1)-(7×7) Surface..... 365
 Ultramicroscopy, 105 (2005) pp.32-41
 Kehui Wu, Y. Fujikawa, T. Briere, V. Kumar, Y. Kawazoe and T. Sakurai
35. Pristine Semiconducting [110] Silicon Nanowires..... 375
 Nano Lett., 5[11] (2005) pp.2302-2305
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar, Ryunosuke Note and
 Yoshiyuki Kawazoe
36. Reconstruction of Atomic Images from Multiple-Energy X-Ray Holograms of FePt Films by the Scattering Pattern Matrix Method..... 379
 Appl. Phys. Lett., 87[23] (2005) pp.2341041-2341043
 Yukio Takahashi, Eiichiro Matsubara, Yoshiyuki Kawazoe,
 Koki Takanashi and Toshiyuki Shima
37. Theoretical Study on Junctions in Porphyrin Oligomers for Nanoscale Devices..... 382
 Mater. Sci. Eng. C, 25 (2005) pp.718-721
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
 Nobuaki Igarashi and Yoshiyuki Kawazoe
38. Cofolga: a Genetic Algorithm for Finding the Common Folding of Two RNAs..... 386
 Computational Biology and Chemistry, 29 (2005) pp.111-119
 Akito Taneda
39. Ferromagnetic GaN-Cr Nanowires..... 395
 Nano Lett., 5[8] (2005) pp.1587-1590
 Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe

40. Mott Gap Excitations in Twin-Free $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($T_c = 93$ K) Studied by Resonant Inelastic X-Ray Scattering..... 399
 Phys. Rev. Lett., 94 (2005) pp.1870021-1870024
 K. Ishii, K Tsutsui, Y. Endoh, T. Tohyama, K. Kuzushita, T. Inami, K. Ohwada, S. Maekawa, T. Masui, S. Tajima, Y. Murakami and J. Mizuki
41. Momentum Dependence of Charge Excitations in the Electron-Doped Superconductor $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$: A Resonant Inelastic X-Ray Scattering Study..... 403
 Phys. Rev. Lett., 94 (2005) pp.2070031-2070034
 K. Ishii, K Tsutsui, Y. Endoh, T. Tohyama, S. Maekawa, M. Hoesch, K. Kuzushita, M. Tsubota, T. Inami, J. Mizuki, Y. Murakami and K. Yamada
42. The Interaction between d-dot's..... 407
 Physica C, 426-431 (2005) pp.127-131
 Masaki Hirayama, Masahiko Machida, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato
43. Quasi-Particle Spectrum of Nano-Scale Conventional and Unconventional Superconductors under Magnetic Field..... 412
 Physica C, 426-431 (2005) pp.41-45
 Masaru Kato, Hisataka Suematsu, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida
44. Vortex Dynamics in Nano-Scaled Superconducting Complex Structures (d-dot) 417
 Physica C, 426-431 (2005) pp.122-126
 Masayuki Ako, Masahiko Machida, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato
45. First-Principles Predictions of Giant Electric Polarization..... 422
 Jpn. J. Appl. Phys., 44[9B] (2005) pp.7130-7133
 Yoshitaka Uratani, Tatsuya Shishidou, Fumiyuki Ishii and Tamio Oguchi

46. Numerical Study of the Electronic States in Hole- and Electron-Doped High- T_c Cuprates..... 426
 Int. J. of Modern Phys. B, 19[1, 2&3] (2005) pp.115-117
 Takami Tohyama
47. Excitonic Effect on the Optical Response in the One-Dimensional Two-Band Hubbard Model..... 429
 Phys. Rev. B, 71 (2005) pp.1531061-1531064
 H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa
48. Theory of RIXS in Strongly Correlated Electron Systems: Mott Gap Excitations in Cuprates..... 433
 J. Phys. Chem. Solids, 66 (2005) pp.2139-2144
 T. Tohyama, K. Tsutsui and S. Maekawa

<2006 年>

1. Hardness and Oxidation Resistance of the Perovskite-Type $RRh_3B_xC_{1-x}$ ($R=Y, Sc$)..... 439
 J. Alloys. Compd., 408-412 (2006) pp.375-378
 T. Shishido, Y. Ishizawa, J. Ye, S. Okada, K. Kudou, K. Iizumi, M. Oku, M. Tanaka, A. Yoshikawa, A. Nomura, T. Sugawara, S. Tozawa, K. Obara, S. Oishi, N. Kamegashira, T. Amano, R. Sahara, V. Kumar, H. Horiuchi, S. Kohiki, Y. Kawazoe and K. Nakajima
2. Synthesis, Boron-Nonstoichiometry and Hardness of Perovskite-Type Rare Earth Rhodium Borides RRh_3B_x ($R = La, Gd, Lu$ and Sc) 443
 J. Alloys. Compd., 408-412 (2006) pp.379-383
 T. Shishido, J. Ye, S. Okada, K. Kudou, K. Iizumi, M. Oku, Y. Ishizawa, R. Sahara, V. Kumar, A. Yoshikawa, M. Tanaka, H. Horiuchi, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara, T. Amano S. Kohiki, Y. Kawazoe and K. Nakajima
3. Thermoelectric Properties of a Nanocontact Made of Two-Capped Single-Wall Carbon Nanotubes Calculated within the Tight-Binding Approximation... 448
 Phys. Rev. B, 73[8] (2006) pp.0854061-0854066
 Keivan Esfarjani, Mona Zebarjadi and Yoshiyuki Kawazoe

4. A General-Purpose Approach for Calculating Transport in Contact-Molecule-Contact System: TARABORD Implementation and Application to a Polythiophene-Based Nanodevice..... 454
Thin Solid Films, 499 (2006) pp.269-274
Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

5. Interaction of Single-Walled Carbon Nanotubes with Alkylamines: An *Ab Initio* Study..... 460
Thin Solid Films, 499 (2006) pp.256-258
Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Hitoshi Nejo, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

6. *Ab Initio* Quantum Chemical Investigation of Several Isomers of Anionic Si₆..... 463
Chem. Phys. Lett., 418 (2006) pp.475-480
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

7. *Ab Initio* Calculations of the Stability of a Vacancy in Na Clusters and Correlation with Melting..... 469
Phys. Rev. B, 73[3] (2006) pp.0354251-0354256
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

8. Interaction between a Single Pt Atom and a Carbon Nanotube Studied by Density Functional Theory..... 475
Phys. Rev. B, 73[12] (2006) pp.1254101-1254106
G. Chen and Y. Kawazoe

9. First-Principles Calculations of Hyperfine Parameters with the All-Electron Mixed-Basis Method..... 481
Phys. Rev. B, 73[4] (2006) pp.04511101-04511121
M. S. Bahramy, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe

10. Lattice Constants and Electron Gap Energies of Nano- and Subnano-Sized Cerium Oxides from the Experiments and First-Principles Calculations... 502
J. Alloys. Compd., 408-412 (2006) pp.1145-1148
S. Tsunekawa, J.-T. Wang and Y. Kawazoe

11. Finite-Temperature Magnetism of Tetragonal Iron..... 506
 Appl. Phys. Lett., 88[13] (2006) pp.1325131-1325133
 Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang and Y. Kawazoe

12. Microscopic Model of Clathrate Compounds..... 509
 Journal of Physics: Conference Series [ACCMS-3], 29 (2006) pp.1-7
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, D. S. Krupskii, O. V. Prokuda, R. V.
 Belosludov and Y. Kawazoe

13. Thermodynamic Properties of Hydrate Phases Immersed in Ice Phase..... 516
 Journal of Physics: Conference Series [ACCMS-3], 29 (2006) pp.198-205
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, D. S. Krupskii, T. Ikeshoji,
 R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh

14. Local Pressure and Density Distribution in Methane Hydrate-Ice *Ih*
 System..... 524
 Journal of Physics: Conference Series [ACCMS-3], 29 (2006) pp.206-209
 O. S. Subbotin, T. Ikeshoji, V. R. Belosludov, J. Kudoh, R. V. Belosludov and
 Y. Kawazoe

15. First-Principles-Based Simulations of Relaxor Ferroelectrics..... 528
 Phase Transitions, 79[1-2] (2006) pp.91-121
 B. P. Burton, E. Cockayne, S. Tinte and U. V. Waghmare

16. First Principles Investigation of the Magnetic Circular Dichroism Spectra of
 Co-Doped Anatase and Rutile TiO₂..... 559
 Phys. Rev. B, 73[12] (2006) pp.1212011-1212014
 Hongming Weng, Jinming Dong, T. Fukumura, M. Kawasaki and Y. Kawazoe

17. Thickness Dependence of the Atomic and Electronic Structures of TiO₂ Rutile
 (110) Slabs and the Effects on the Electronic and Magnetic Properties of
 Supported Clusters of Pd and Rh..... 563
 Phys. Rev. B, 73[7] (2006) pp.07540101-07540110
 P. Murugan, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

18. Using First-Principles Results to Calculate Finite-Temperature Thermodynamic Properties of the Nb-Ni μ Phase in the Bragg-Williams Approximation••• 573
Philosophical Magazine, 86[12] (2006) pp.1631-1641
N. Dupin, S. G. Fries, J.-M. Joubert, B. Sundman, M.H.F. Sluiter, Y. Kawazoe and A. Pasturel

19. Intermolecular Potential for Methane in Zeolite A and Y: Adsorption Isotherm and Related Properties••••• 584
Solid State Sci., 8 (2006) pp.248-258
Pradip Kr. Ghorai, Marcel Sluiter, S. Yashonath and Y. Kawazoe

20. Electronic and Transport Properties of Ferrocene: Theoretical Study••••• 595
Jpn. J. Appl. Phys., 45[4B] (2006) pp.3768-3771
Tomoki Uehara, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

21. Electronic and Magnetic Properties of Double-Impurities-Doped TiO₂ (rutile): First-Principles Calculations••••• 599
J. Appl. Phys., 99[8] (2006) pp.08M1051-08M1053
P. Murugan, R.V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Nishimatsu, T. Fukumura, M. Kawasaki and Y. Kawazoe

22. Stable Aluminum and Chromium Oxide Clusters as Precursors to Nanoscale Materials••••• 602
Compt. Mater. Sci., 35 (2006) pp.366-370
T. Morisato, N.O. Jones, S.N. Khanna and Y. Kawazoe

23. Origin and Temperature Dependence of the Electric Dipole Moment in Niobium Clusters••••• 607
Phys. Rev. B, 73[12] (2006) pp.12541801-12541814
Kristopher E. Andersen, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Warren E. Pickett

24. Quasi-Particle Spectrum of Nano-Scale Superconducting Plate under a
Magnetic Field..... 621
J. Phys. Chem. Sol., 67 (2006) pp.369-372
Masaru Kato, Hisataka Suematsu, Masahiko Machida, Tomio Koyama and
Takekazu Ishida
25. Symmetry of Photoexcited States and Large-Shift Raman Scattering in
Two-Dimensional Mott Insulators..... 625
J. Phys. Soc. Jpn., 75[3] (2006) pp.0347131-0347136
T. Tohyama

III. 国際会議発表論文

<2005 年>

1. *Ab Initio* Calculation of Transport through DNA and Its Sodium Salt..... 631
207th Meeting of the Electrochemical Society
Quebec, Canada (2005.5.15-20)
O. V. Pupysheva, A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and
Y. Kawazoe

2. Role of Guest Molecules on the Formation of Clathrate Crystal Nuclei
Investigated by First-Principles Calculations..... 632
The Fifth International Conference on Gas Hydrates (ICGH5)
Trondheim, Norway (2005.6.12-16) Paper ref. 2031 pp.615-620
R. V. Belosludov, V. R. Belosludov, J. Kudoh and Y. Kawazoe

3. Structural and Thermodynamic Properties of Gas Hydrate Phases Immersed in
the Ice Phase..... 638
The Fifth International Conference on Gas Hydrates (ICGH5)
Trondheim, Norway (2005.6.12-16) Paper ref. 2033 pp.631-637
V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, D. S. Krupskii, T. Ikeshoji,
R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh

4. Theoretical Study of Hydrogen Clathrate Hydrates..... 645
The Fifth International Conference on Gas Hydrates (ICGH5)
Trondheim, Norway (2005.6.12-16) Paper ref. 5003 pp.1467-1475
Marcel Sluiter, Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov,
Yoshiyuki Kawazoe, Oleg S. Subbotin and Vladimir R. Belosludov

5. Silicon Fullerene..... 654
1st NAREGI International Nanoscience Conference
Nara, Japan (2005.6.14-18) p.62 No.1P03
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

6. Structural Study of Magnesium Oxide Nanoclusters..... 655
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.80 No.1P21
 Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

7. *Ab Initio* Study of Ground and Excited States of Organic and Organometallic
 Chromophores..... 656
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.100 No.1P41
 Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
 Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe

8. Large Scale Computational Approach for Molecular Devices: Electronic and
 Transport Properties..... 657
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.125 No.1P66
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and
 Yoshiyuki Kawazoe

9. Transport Characteristics of a Gated Molecular Device..... 658
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.140 No.2P11
 A.A. Farajian, R.V. Belosludov, T. Hashizume, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

10. Theoretical Study on Planar Anionic Polysilicon Chains and Cyclic Si₆ Anions
 with D_{6h} Symmetry..... 659
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.171 No.2P42
 Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

11. *Ab Initio* Study of Electronic Structure and Conductance of DNA Molecule:
 Effect of Sodium Counterions..... 660
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.173 No.2P44
 Olga V. Pupysheva, Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

12. Elastic Properties of the Perovskite-Type ScRh_3B_x and $\text{ScRh}_3\text{B}_xC_{1-x}$ 661
 1st NAREGI International Nanoscience Conference
 Nara, Japan (2005.6.14-18) p.193 No.2P64
 R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar,
 K. Nakajima and Y. Kawazoe

13. Interaction of Water and Methanol with C_{60} and (10,10) Single Wall Carbon
 Nanotube 662
 The 5th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing
 of Materials (IPMM2005)
 Monterey, California, USA (2005.7.19-23)
 Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe, Maher Amer and John F. Maguire

14. Self-Consistent Calculations of Transport Through a Molecular Wire as an
 Open System 663
 The 5th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing
 of Materials (IPMM2005)
 Monterey, California, USA (2005.7.19-23)
 F. Jiang, Y. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

15. Evolutionary Approach to Organic Molecules for Nanoscale Devices 664
 The 5th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing
 of Materials (IPMM2005)
 Monterey, California, USA (2005.7.19-23)
 Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian
 and Yoshiyuki Kawazoe

16. *Ab Initio* Computer Simulation to Predict New Materials for
 Nanotechnology 668
 The 5th International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing
 of Materials (IPMM2005)
 Monterey, California, USA (2005.7.19-23)
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

17. Infrared Absorption of DAST: Theoretical Study..... 676
International School of Solid State Physics 35th Workshop: Physics and
Technology of THz Photonics
Erice, Italy (2005.7.20-26)
Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe
18. Theoretical Study on Planar Anionic Polysilicon Chains and Cyclic Si₆ Anions
with D_{6h} Symmetry..... 677
14th International Symposium on Organosilicon Chemistry (Oral Presentation)
Würzburg, Germany (2005.7.31-8.5)
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
19. Evaluation of Ideal Strength of Metal-Ceramics Interface using First-Principles
Calculations..... 678
JiLin-Tohoku "21COE" Joint Workshop on Mechanical Science based on
Nanotechnology
JiLin University, China (2005.8.19-20) pp.27-29
M. Satou, M. Kakie, T. Komatsu, A. Hasegawa and K. Abe
20. A First Principles Study of the Elastic Properties of Perovskite-Type Rare Earth
Rhodium Borides..... 681
ISBB'05 15th International Symposium on Boron, Borides and Related
Materials
Hamburg, Germany (2005.8.21-26) p.78 No. I-A-6
R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar,
K. Nakajima and Y. Kawazoe
21. Synthesis and Characterization of the Nonstoichiometric Perovskite-Type
Boride CeRh₃B..... 682
ISBB'05 15th International Symposium on Boron, Borides and Related
Materials
Hamburg, Germany (2005.8.21-26) p.119 No. II -A-11
T. Shishido, J. Ye, M. Oku, T. Sasaki, S. Okada, K. Kudou, K. Iizumi,
Y. Ishizawa, R. Sahara, V. Kumar, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara,
M. Tanaka, K. Shimamura, S. Oishi, N. Kamegashira, S. Kohiki, Y. Kawazoe
and K. Nakajima

22. Recovery Technique of Unhydrated Cement Grains from Waste Fresh Concrete by Lime Stabilization..... 683
 30th Conference on OUR WORLD IN CONCRETE&STRUCTURES
 Singapore (2005.8.23-24) pp.287-292
 A. Ishii, R. Sakurada, K. Maruyama, K. C. G. Ong and Y. Kawazoe
23. Durability of Sprayed Mortar in Cold Region –Resistance to Chloride Attack and Freeze -Thaw— 689
 30th Conference on OUR WORLD IN CONCRETE&STRUCTURES
 Singapore (2005.8.23-24) pp.385-390
 R. Sakurada, K. Hirata, S. Kawashima, T. Shimomura and Y. Kawazoe
24. Prediction of Nanoscale Materials by First Principles Calculations..... 695
 The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-3"
 Beijing, China (2005.9.8-11) No. C1
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
 Olga V. Pupysheva, Chiranjib Majumder, Jian-Tao Wang, Hao Chen,
 Nobuaki Igarashi, Tomoki Uehara and Yoshiyuki Kawazoe
25. Electronic Mechanism of the Role of Vacancies in the Elastic Properties of Perovskite-Type Rare Earth Rhodium Borides..... 696
 The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-3"
 Beijing, China (2005.9.8-11) No.G4
 R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar,
 K. Nakajima and Y. Kawazoe
26. Thermodynamic Properties of Hydrate Phases Immersed in the Ice Phase• 697
 The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials Science "ACCMS-3"
 Beijing, China (2005.9.8-11) No.I1
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, D. S. Krupskii, T. Ikeshoji,
 V. R. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh

27. The First Principles Study of Pt Adsorbed on Carbon Nanotube..... 698
The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials
Science "ACCMS-3"
Beijing, China (2005.9.8-11) No. PB20
G. Chen and Y. Kawazoe
28. Nanotubular Clusters of Zinc Oxide..... 699
The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials
Science "ACCMS-3"
Beijing, China (2005.9.8-11) No. PB21
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
29. The Vibrational Spectra of Trehalose and Glucose: Terahertz Spectroscopy and
Density Functional Theory Calculations..... 700
The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials
Science "ACCMS-3"
Beijing, China (2005.9.8-11) No. PC48
Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe, Yoichi Ishikawa and Hiromasa Ito
30. Magnetic Phase Transition in Tetragonal Fe..... 701
The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials
Science "ACCMS-3"
Beijing, China (2005.9.8-11) No. PC55
Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang, Y. Kawazoe
31. Ultra-Large Scale *Ab Initio* Computer Simulation to Predict New Materials for
Nanotechnology Including Electron Correlation..... 702
The Third Conference of the Asian Consortium for Computational Materials
Science "ACCMS-3"
Beijing, China (2005.9.8-11) No. PD74
Yoshiyuki Kawazoe

32. Electronic and Transport Properties of Ferrocene Molecule: Theoretical Study..... 703
International Conference on Solid State Devices and Materials 2005 (SSDM2005)
Kobe, Japan (2005.9.13-15) pp.798-799 No.P10-2
Tomoki Uehara, Hidetoshi Baba, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
33. Electronic and Structural Properties of Organic Molecules inside Carbon Nanotube..... 705
International Conference on Solid State Devices and Materials 2005 (SSDM2005)
Kobe, Japan (2005.9.13-15) pp.1002-1003 No.G-8-2
Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and Yoshiyuki Kawazoe
34. Far-Infrared Absorption of DAST: Theoretical Study..... 707
The Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW2005/THz2005)
Virginia, USA (2005.9.19-23) pp.178-179
T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, M. Takahashi, S. Saito and Y. Kawazoe
35. The Vibrational Spectra of Trehalose and Glucose: Terahertz Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations..... 709
The Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics (IRMMW2005/THz2005)
Virginia, USA (2005.9.19-23) pp.219-220
Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe, Yoichi Ishikawa and Hiromasa Ito

36. Prediction of Reaction Pathways and New Properties in Organosilicon Compounds Based on *Ab Initio* MO and Density Functional Theory Calculations..... 711
International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2005 (ICCMSE2005)
Loutraki, Greece (2005.10.21-26) pp.807-810
Masae Takahashi
37. First-Principles Based Simulations of Relaxor Ferroelectrics..... 715
12th US-Japan Seminar on Dielectric and Piezoelectric Ceramics
Annapolis, Maryland, USA (2005.11.6-9)
Benjamin Burton, Eric Cockayne and Umesh Waghmare
38. Evaluation of Ideal Strength of Metal and Oxide Ceramics Interface using First-Principles Calculations..... 716
The 3rd International Symposium on Mechanical Science based on Nanotechnology
Sendai, Japan (2005.11.18-19) pp.151-153
M. Satou, M. Kakie, A. Hasegawa and K. Abe
39. Prediction of Transport Properties through Molecular Devices by First Principles Calculations..... 719
2005 MRS Fall Meeting
Boston, MA, USA (2005.11.28-12.2) No. 13.31
H. Mizuseki, R. Belosludov, A. Farajian, O. Pupyshcheva, C. Majumder, J. Wang, H. Chen, T. Uehara, N. Igarashi and Y. Kawazoe
40. Theoretical Study of CdSe-based Nanomaterials for Nanomedicine Application..... 720
2005 MRS Fall Meeting
Boston, MA, USA (2005.11.28-12.2) No. Ra7.3
R. V. Belosludov, V. Kumar, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe
41. Evaluation of Interfacial Strength between Yttrium Oxides and Vanadium • 721
12th International Conference on Fusion Reactor Materials
Santa Barbara, California, USA (2005.12.4-9) p.80
M. Satou, M. Kakie, M. Fujiwara, T. Sawada, T. Komatsu and K. Abe

42. Revival of Alchemy by *Ab initio* Computer Simulation..... 722
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.16
Yoshiyuki Kawazoe
43. DFT Analysis of Spin Polarization Mechanism in Core Region Using the
All-Electron Mixed Basis Method..... 723
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.45
Mohammad Saeed Bahramy, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
44. *Ab Initio* Study of a Vacancy in Sodium Nano Clusters..... 724
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.46
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
45. Study of Electronic Transport of Nanodevices..... 725
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.47
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
46. Theoretical Study of the Solvent Effect on the Intramolecular Charge Transfer
in the Dipolar Pyridinium Chromophores..... 726
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.48
Talgat Inerbaev, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
47. Stabilization Mechanism of Edge States in Graphene..... 727
International Conference on Frontiers of Materials Science
Tohoku Univ., Sendai, Japan (2005.12.7-9) p.49
K. Sasaki, S. Murakami, R. Saito and Y. Kawazoe

48. Synthesis, Boron-nonstoichiometry and Hardness of Perovskite-Type RRh_3B_x (R = La, Gd, Lu, and Sc) 728
 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2005
 Hawaii, USA (2005.12.15-20)
 Toetsu Shishido, Shigeru Okada, Akiko Nomura, Masaoki Oku, Ryoji Sahara,
 Vijay Kumar, Kunio Yubuta, Takamasa Sugawara, Yoshiyuki Kawazoe and
 Kazuo Nakajima

<2006 年>

1. *Ab-Initio* Study of Hyperfine Parameters Using All Electron Mixed-Basis Method; An Approach to Find Out The Spin Polarization Mechanism of Core Levels 729
 Innovative Nanoscale Approach to Dynamic Studies of Materials
 Okinawa, Japan (2006.1.9-14)
 Mohammad Saeed Bahramy, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
2. First Principles based Simulations of PSN and PMN 730
 Fundamental Physics of Ferroelectrics Workshop 2006
 Williamsburg, Virginia, USA (2006.2.12-15) (Invited talk)
 B. P. Burton, Eric Cockayne, S. Tinte and U. V. Waghmare
3. Theoretical Study of Novel Quantum Dots for Application in Cancer Diagnostics 732
 NanoMed 2006, 5th International Workshop on Biomedical Applications of Nanotechnology
 Berlin, Germany (2006.2.16-17) p.92
 Rodion Belosludov, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
4. First-Principles Calculations of Multiply Charged Silicon Cluster Anions: Stable Structure and Physical Properties 733
 International COE Symposium on Computational Nanoscience
 Sendai, Japan (2006.2.17) p.4
 Masae Takahashi

5. The Effect of Metal Clustering on Hydrogen Storage..... 734
2006 APS March Meeting
Baltimore, USA (2006.3.13-17) p.487
Puru Jena, Qian Wang, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe

6. Structures and Magnetic Properties of Cr-Doped GaN Nanotubes..... 734
2006 APS March Meeting
Baltimore, USA (2006.3.13-17) p.1432
Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

IV. 紀要

<2005 年>

1. 学内 LAN を活用した教育支援システム..... 735
東北工業大学情報処理技術研究所紀要 EOS
Vol. 18, No.1 (2005.3.11) pp.93-100
小島正美、藤田浩三、川添良幸
2. ナノテクノロジー研究部会..... 743
学術情報ネットワーク(スーパーSINET 平成 16 年度版)成果報告集
(2005.4) pp.195-203
川添良幸、高山 一、常行真司、青柳 睦、堀口 進、井口 寧、
小口多美夫、一関京子、林 亮子、獅子堂達也、南 貴博
3. Ultra-Stable Nanoparticles of CdSe Revealed from Mass Spectrometry... 752
新素材設計開発施設研究成果報告書 平成 16 年度
(2005.6) pp.103-106
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
4. Dynamical Criteria for Cs Ion Insertion and Adsorption at Cap and Stem of
Carbon Nanotubes: *Ab Initio* Study and Comparison with Experiment..... 756
新素材設計開発施設研究成果報告書 平成 16 年度
(2005.6) pp.107-113
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Goo-Hwan Jeong, Hiroshi Mizuseki,
Takamichi Hirata, Rikizo Hatakeyama and Yoshiyuki Kawazoe
5. GeSi 等のIV族系混晶の育成とそのため技術開発 GeSi 結晶の原子スケール
での構造について..... 763
金属ガラス総合研究センター(旧新素材設計開発施設)
共同利用研究報告書 平成 16 年度 (2005.6) pp.213-214
米永一郎、櫻井雅樹、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸、戸澤慎一郎、
宍戸統悦

6. 複数のスーパーコンピューターを利用したナノテクシミュレーション環境の構築..... 765
平成 16 年度 ITBL 成果報告集 (2005.6) pp.82-83 No.13.3
川添良幸

- <2006 年>
1. 第一原理シミュレーション計算による新物質設計..... 767
21st COE Program 2005 活動成果報告書 (2006.3) pp.50-52
川添良幸
2. カーボンナノチューブ系における幾何構造と物性..... 770
21st COE Program 2005 活動成果報告書 (2006.3) pp.81-83
佐々木健一
3. スーパーSINET 上の遠隔スパコン分散処理による第一原理計算..... 773
国立情報学研究所 平成 17 年度 CSI 委託事業 報告交流会 報告資料集
第 2 日 ネットワーク系 東京 (2006.5.17) pp.35-41
川添良幸
4. ITBL を利用した超大規模材料設計シミュレーション計算環境の最先端学術情報基盤への構築..... 780
国立情報学研究所 平成 17 年度 CSI 委託事業 報告交流会 予稿集
第 2 日 ネットワーク系 東京 (2006.5.17) pp.10-11
川添良幸
5. クラスターの固相－固相構造転移の研究..... 782
平成 17 年度 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告
(2006.6) p.194
川添良幸、池庄司民夫

V. 予稿集・講演会・研究会等

予稿集

<2005 年>

1. ペロブスカイト型ボライド RRh_3B ($R = Ce, Sc$)の合成および性質…………… 783
第3回ホウ素・ホウ化物研究会
長岡 (2005.3.5) pp.43-45
宍戸統悦、野村明子、葉 金花、奥 正興、佐原亮二、湯蓋邦男、
ビジェイ・クマール、岡田 繁、工藤邦男、飯泉清賢、石沢芳夫、
田中雅彦、菅原孝昌、小原和夫、大石修治、亀頭直樹、古曳重美、
川添良幸、中嶋一雄
2. ナノテクと今後の我が国の産業育成…………… 786
ナノ学会第3回大会 講演予稿集 パネルディスカッション
仙台 (2005.5.8-10) p.35
パネリスト:尾身幸次、黒川 卓、浅野史郎
司会:川添良幸
3. セメント水和物の原子構造の第一原理計算…………… 787
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.38 No.1a-2
桜田良治、Tina Marie Briere、Abhishek Kumar Singh、川添良幸
4. 新規X線造影剤シリカコーティング AgI ナノビーズの基礎的検討…………… 788
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.48 No.1p-6
武田元博、小林芳男、桜井 遊、河合賢朗、中島護雄、亀井 尚、
粕谷厚生、川添良幸、佐竹正延、大内憲明
5. ナノ・クラスタ科学を対象とした第一原理量子モンテカルロ計算…………… 789
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.57 No.3a-4
前園 涼、本郷研太、小山田隆行、水関博志、高橋まさえ、
ビジェイ・クマール、川添良幸、安原 洋

6. 水素分子の化学結合に関する研究..... 790
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.64 No.PS1-02
本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
7. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる遷移金属の
熱力学的諸特性..... 791
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.65 No.PS1-03
佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
8. Nanowires of Silicon..... 792
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.68 No.PS1-06
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
9. Cr_3^+ の光解離分光: 電子構造・幾何構造と磁気特性..... 793
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.89 No.PS1-27
間嶋拓也、登野健介、寺寄 亨、川添良幸、近藤 保
10. 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..... 794
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.110 No.PS1-48
源 聡、小無健司、松井秀樹、川添良幸、加藤正人
11. 安息香酸及びその誘導体のテラヘルツスペクトルと振動モード解析..... 795
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.131 No.PS1-69
斎藤繁喜、高橋まさえ、水関博志、Talgat M. Inerbaev、川添良幸、
石川陽一、伊藤弘昌
12. Far-Infrared Absorption of Dast: Theoretical Study..... 796
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.133 No.PS1-71
Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe

13. 可視化ソフトウェア AVS と 3 次元 VR システム CAVE を用いたナノテク用
新材料シミュレーションデータの半自動可視化システム…………… 797
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.137 No.PS2-01
林 亮子、堀井 洋、井口 寧、北川千夏、永田哲史、一関京子、
川添良幸、堀口 進
14. 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…………… 798
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.139 No.PS2-03
一関京子、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸、高橋英明、安達 斉、
山口 裕
15. 第一原理計算と遺伝的アルゴリズムによる分子デバイス用材料の探索… 799
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.140 No.PS2-04
五十嵐伸昭、水関博志、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、川添良幸
16. 4d 遷移金属クラスターの非稠密構造…………… 800
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.141 No.PS2-05
斐 栄造、長内弘喜、Vijay Kumar、川添良幸
17. 金属ポルフィリンおよび金属フタロシアニンの電気的特性についての
理論解析…………… 801
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.145 No.PS2-09
上原朋樹、馬場英年、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、
川添良幸
18. First-Principles Study on CdSe Nanoclusters for Application in
Nanomedicine…………… 802
ナノ学会第 3 回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.158 No.PS2-22
R.V. Belosludov, V. Kumar, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe

19. *Ab Initio* Study of the Effect of Na⁺ Counterions on DNA Conductance... 803
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.172 No.PS2-36
O. V. Pupysheva, A. A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and
Y. Kawazoe
20. 逆ミセル中で成長する(CdSe)_n ナノ粒子の光吸収スペクトルによる観察... 804
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.186 No.PS2-50
野田泰斗、粕谷厚生、川添良幸、武田元博、大内憲明
21. Ba₈Ga₁₆Sn₃₀ クラスレートの電子構造と熱電特性..... 805
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.189 No.PS2-53
古賀健治、亀井達也、赤井光治、松浦 満
22. 第一原理計算によるポストDAST 結晶の理論設計..... 806
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.190 No.PS2-54
斎藤繁喜、高橋まさえ、水関博志、五十嵐伸昭、Talgat M. Inerbaev、
川添良幸
23. 量子モンテカルロ法による第二周期原子系列のフント則に関する解釈... 807
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.191 No.PS2-55
小山田隆行、本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
24. 第一原理計算による Na クラスターの原子空孔の安定性..... 808
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.192 No.PS2-56
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
25. 拡散モンテカルロ法による Cr@Si₁₂ クラスターの電子相関..... 809
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.224 No.PS3-14
本郷研太、前園 涼、Vijay Kumar、川添良幸、安原 洋

26. Doping Effects on Transport Properties of a Polythiophene-Based Nanodevice..... 810
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.234 No.PS3-24
 A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. Field Emission Patterns through *Ab Initio* Calculations..... 811
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.242 No.PS3-32
 M. Khazaei, A.A. Farajian and Y. Kawazoe
28. Magic Nanoclusters of Magnesium Oxide..... 812
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.243 No.PS3-33
 Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
29. First-Principle Calculations of Hyperfine Parameters with Mixed Basis Method: An All Electron Approach to Hyperfine Structure..... 813
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.245 No.PS3-35
 Mohammad Saeed Bahramy, Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
30. Stabilizing the Silicon Fullerene Si₂₀ by Thorium Encapsulation..... 814
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.246 No.PS3-36
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
31. ペロブスカイト型希土類ロジウムホウ化物 ScRh₃B_x(0 ≤ x ≤ 1)の弾性特性への空孔の効果..... 815
 ナノ学会第3回大会 講演予稿集
 仙台 (2005.5.8-10) p.247 No.PS3-37
 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

32. Fabrication of Site-Controlled Surface Ga and GaN Nanostructures by Ion Beam Synthesis..... 816
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.253 No.PS3-43
R. Buckmaster, Y. Yao, M. Yokoyama, T. Sekiguchi, T. Goto, Y. Kawazoe and Takafumi Yao
33. 2次元層状化合物 Na_xCoO_2 の電子構造と熱電特性..... 817
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.257 No.PS3-47
趙 国軍、古賀健治、赤井光治、松浦 満
34. 第一原理計算によるフェロセン分子の導電性評価..... 818
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.258 No.PS3-48
上原朋樹、馬場英年、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、水関博志、川添良幸
35. Configuration of Organic Molecules inside Carbon Nanotube: Theoretical Study..... 819
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.259 No.PS3-49
R.V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and Y. Kawazoe
36. Quadratic Nonlinear Optical Properties of Organometallic Chromophores • 820
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.265 No.PS3-55
Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe
37. チタンクラスターイオンへの窒素分子吸着反応..... 821
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.273 No.PS3-63
市橋正彦、半村 哲、Marcel Sluiter、川添良幸、近藤 保

38. トレハロースとグルコースの振動スペクトル
ーテラヘルツ分光法と密度汎関数計算ー…………… 822
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.275 No.PS3-65
高橋まさえ、川添良幸、石川陽一、伊藤弘昌
39. Vertical Electron Transport in Layered Semiconductor Nanostructures………… 823
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.280 No.PS3-70
O.V. Pupysheva, A.V. Dmitriev, A.A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
40. First-Principles Study on Atomic and Molecular Wires: Electronic and
Transport Properties…………… 824
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.283 No.PS4-03
R.V. Belosludov, A. Farajian, H. Baba, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
41. Magnetic Fullerenes of Silicon by Metal Encapsulation…………… 825
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.292 No.PS4-12
Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
42. 酸化ジルコニウムナノ粒子の相転移と酸素欠損について…………… 826
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.294 No.PS4-14
恒川 信、伊藤 俊、八島正知、川添良幸
43. シリコンゲルマニウム固溶体の原子構造…………… 827
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.295 No.PS4-15
米永一郎、櫻井雅樹、M. Sluiter、川添良幸
44. ワイドギャップフッ化物へテロ構造体の深紫外発光素子としての可能性… 828
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.301 No.PS4-21
小野晋吾、村上英利、R.El Ouenzerfi、猿倉信彦、西松 毅、
寺久保憲昭、水関博志、川添良幸、吉川 彰、福田承生

45. IV族クラスレート化合物に対する元素置換が電子構造に及ぼす効果・・・ 829
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.305 No.PS4-25
赤井光治、趙 国軍、古賀健治、大城和宣、松浦 満
46. 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・・・・・・・・・・・・・・・・ 830
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.306 No.PS4-26
高橋まさえ、川添良幸
47. Theoretical Investigation of Transport through a Gated Nanodevice・・・・・・・・ 831
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.307 No.PS4-27
A.A. Farajian, R.V. Belosludov, T. Hashizume, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
48. 第一原理計算によるナノデバイス用材料の導電性評価・・・・・・・・ 832
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.334 No.PS4-54
水関博志、馬場英年、上原朋樹、R.V. Belosludov、A.A. Farajian、
O.V. Pupysheva、C. Majumder、五十嵐伸昭、川添良幸
49. The First Principles Study of Pt Adsorbed on Carbon Nanotube・・・・・・・・ 833
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.338 No.PS4-58
G. Chen and Y. Kawazoe
50. Study of Zinc Oxide Nanoclusters Structures・・・・・・・・ 834
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.339 No.PS4-59
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
51. Magnetism in Transition Metal Clusters Supported on (110) Surface of TiO_2
Rutile-First Principles Calculations・・・・・・・・ 835
ナノ学会第3回大会 講演予稿集
仙台 (2005.5.8-10) p.340 No.PS4-60
P. Murugan, V. Kumar and Y. Kawazoe

52. ペロブスカイト型ボライド CeRh_3B のホウ素不定比と性質…………… 836
第 22 回希土類討論会
大阪 (2005.5.25-26) pp.72-73 No.1B-14
宍戸統悦、野村明子、葉 金花、奥 正興、佐原亮二、
ビジェイ・クマール、岡田 繁、工藤邦男、飯泉清賢、石沢芳夫、
田中雅彦、菅原孝昌、小原和夫、大石修治、亀頭直樹、古曳重美、
川添良幸、中嶋一雄
53. GaN Dot Formation by Implant Source Growth…………… 838
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.5
R. Buckmaster, Y. Yao, M. Yokoyama, T. Sekiguchi, J. H. Yoo, K. Shin,
T. Hanada, T. Goto, Y. Kawazoe and T. Yao
54. 第一原理計算による安息香酸とその誘導体のテラヘルツスペクトル解析・ 839
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.20
斎藤繁喜、高橋まさえ、水関博志、Talgat M. Inerbaev、川添良幸、
石川陽一、伊藤弘昌
55. 第一原理平面波擬ポテンシャル法による PuO_{2-x} の点欠陥の計算…………… 840
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.21
小無健司、松井秀樹、川添良幸、源 聡、加藤正人
56. 拡散モンテカルロ法による $\text{Cr}@\text{Si}_{12}$ クラスターの電子相関…………… 841
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.54
本郷研太、前園 涼、Vijay Kumar、川添良幸、安原 洋
57. A Single Chain Magnet Case Study. The *Ab Initio* Analysis of the Magnetic
Anisotropy and Ferromagnetic Coupling…………… 842
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.55
Y. Kawazoe, F. Cimpoesu, M. Ferbinteanu and M. Yamashita

58. Transport Properties of Some Molecular Electronic Devices..... 843
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.56
A.A. Farajian, R.V. Belosludov, O.V. Pupysheva, H. Mizuseki and
Y. Kawazoe
59. The First Principles Study of Pt Adsorbed on Carbon Nanotube..... 844
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.57
G. Chen and Y. Kawazoe
60. *Ab Initio* Study of Ground and Excited States of Organic and Organometallic
Chromophores..... 845
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.58
Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe
61. First Principles Studies of Zinc Oxide Nanotube..... 846
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.59
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
62. Effect of Sodium Counterions on DNA Conductance: An *Ab Initio* Study• 847
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.60
O.V. Pupysheva, A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and
Y. Kawazoe
63. Atomic Structures and Magnetism of Mo_xS_y Clusters..... 848
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.61
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota

64. Paired and Unpaired Spins in Polyhedranes C_nH_n , Polyenes C_nH_n , and Polyacenes $C_{4n+2}H_{2n+2}$. From Molecules to Materials..... 849
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.62
F. Cimpoesu, M.R. Philpott and Y. Kawazoe
65. Na クラスターの原子空孔..... 850
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.63
伊藤正寛、Vijay Kumar、川添良幸
66. $SrTiO_3$ の全エネルギー表面に対する格子歪み効果の理論的解析..... 851
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.64
橋本孝俊、西松 毅、水関博志、川添良幸、佐々木淳、池田義秋
67. アニオン性ポリシリコンとアニオン性ケイ素6員環の理論計算..... 852
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.65
高橋まさえ、川添良幸
68. 量子モンテカルロ法による第二周期原子系列のフント則に関する解釈... 853
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.66
小山田隆行、本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
69. First-Principle Calculations of Hyperfine Parameters with Mixed Basis Method: An All Electron Approach to Hyperfine Structure..... 854
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.74
Mohammad Saeed Bahramy, Marcel H.F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
70. 第一原理計算によるフェロセン分子の導電性評価..... 855
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.75
上原朋樹、馬場英年、R.V. Belosludov、A.A. Farajian、水関博志、川添良幸

71. 第一原理計算による ScRh_3B_x および $\text{ScRh}_3\text{B}_x\text{Cl}_{1-x}$ の弾性的諸特性の評価..... 856
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.76
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
72. Stabilizing the Silicon Fullerene Si_{20} by Thorium Encapsulation..... 857
第 109 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年春期)
東北大学金属材料研究所 (2005.5.26-27) p.87
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
73. 石灰処理による廃棄コンクリート中の未水和セメント回収の試み..... 858
第 59 回セメント技術大会講演要旨
東京 (2005.5.25-27) pp.290-291
桜田良治、石井昭浩、丸山久一、川添良幸
74. $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$ クラスレートの Ga 配置安定性と電子構造..... 860
第 2 回熱電学会学術講演会 論文集
湘南工科大学 (2005.8.22-23) pp.98-99
古賀健治、趙 国軍、植村 崇、赤井光治、松浦 満
75. 電子構造計算による Na_xCoO_2 の熱電特性..... 862
第 2 回熱電学会学術講演会 論文集
湘南工科大学 (2005.8.22-23) pp.100-101
趙 国軍、古賀健治、赤井光治、松浦 満
76. Theoretical Study of Electronic and Transport Properties of Doped Carbon Nanotube..... 864
第 66 回応用物理学会学術講演会
徳島大学 (2005.9.7-11) p.421 No.10p-F-17
Rodion V. Belosludov, Nobuaki Igarashi, Hiroshi Mizuseki, Taishi Takenobu, Yoshihiro Iwasa and Yoshiyuki Kawazoe

77. 第一原理計算によるフェロセンおよびポルフィリン分子の導電性評価・・・ 864
第 66 回応用物理学会学術講演会
徳島大学 (2005.9.7-11) p.1101 No.8a-V-6
上原朋樹、五十嵐伸昭、Rodion V. Belosludov、Amir A. Farajian、
水関博志、川添良幸
78. Cr_3^+ の電子構造: 光解離分光と密度汎関数計算・・・・・・・・・・・・ 865
日本物理学会 2005 年秋季大会
大阪市立大学 (2005.9.12-15) p.240 No.21aXG-5
間嶋拓也、登野健介、寺寄 亨、川添良幸、近藤 保
79. 磁場下におけるナノ超伝導板の渦糸分子の準粒子構造・・・・・・・・・・・・ 866
日本物理学会 2005 年秋季大会
大阪市立大学 (2005.9.12-15) p.541 No.21aWF-4
末松久孝、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和
80. 超伝導ネットワークにおける磁束状態の外部電流の影響・・・・・・・・・・・・ 867
日本物理学会 2005 年秋季大会
大阪市立大学 (2005.9.12-15) No.22pPSA-84
佐藤 修、加藤 勝
81. ナノ超伝導複合体 d-dot の相互作用Ⅲ・・・・・・・・・・・・ 868
日本物理学会 2005 年秋季大会 No.19aYL-13
大阪市立大学 (2005.9.12-15) 第 60 巻第 2 号第 4 分冊 p.633, No.19aYL-13
平山昌樹、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和
82. ペロブスカイト型ボライド RRh_3B ($\text{R} = \text{La} \sim \text{Lu}, \text{Y}, \text{Sc}$) の合成および
諸性質・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 869
平成 17 年度化学系学協会東北大会
東北大学 (2005.9.23-25) p.189 No.2P002
宍戸統悦、野村明子、奥 正興、葉 金花、岡田 繁、工藤邦男、
飯泉清賢、佐原亮二、湯蓋邦男、ビジェイ・クマール、菅原孝昌、
戸澤慎一郎、小原和夫、古曳重美、川添良幸、中嶋一雄

83. IT 技術者養成向け日本語教育 Web コースウェア..... 870
平成 17 年度電気関係学会北陸支部連合大会
石川 (2005.9.24-25)
井口 寧、高橋亜紀子、小河原義朗、才田いずみ、堀井 洋、
川添良幸
84. Cr_3^+ の光解離分光: 解離過程の励起エネルギー依存性..... 871
分子構造総合討論会 2005
東京 (2005.9.27-30) No.2P034
間嶋拓也、登野健介、寺寄 亨、川添良幸、近藤 保
85. Density Functional Study of Low-Lying Electronic Excitations in Dipolar
Ruthenium (II) Complexes..... 873
分子構造総合討論会 2005
東京 (2005.9.27-30) No.PR0836
Inerbaev Talgat、Belosludov Rodion、水関博志、高橋まさえ、斎藤繁喜、
川添良幸
86. 第一原理計算による RERh_3B_x (RE = Sc, Y, La) の弾性特性に及ぼす
空孔の効果..... 875
日本金属学会 2005 秋季講演大会
広島大学 (2005.9.28-30) p.459
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
87. 量子モンテカルロ法による第三周期原子系列のフント経験則の解釈..... 875
日本金属学会 2005 秋季講演大会
広島大学 (2005.9.28-30) p.462
小山田隆行、本郷研太、前園 涼、川添良幸、安原 洋
88. 原子空孔を有する Na クラスターのサイズ依存性..... 876
日本金属学会 2005 年秋期講演大会
広島大学 (2005.9.28-30) No.0483-2
伊藤正寛、川添良幸、Vijay Kumar

89. トレハロース関連物質のテラヘルツスペクトルの理論解析..... 877
日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会
徳島大学 (2005.10.15-16) pp.15-16
高橋まさえ、川添良幸
90. The Interaction between Square d-dot's..... 879
第 18 回国際超電導シンポジウム(ISS2005)
筑波 (2005.10.24-26)
M. Hirayama, M. Kato, M. Machida, T. Koyama and T. Ishida
91. ペロブスカイト型希土類ロジウムボライドの合成、単結晶化および評価
第 50 回人工結晶討論会..... 890
名古屋大学 (2005.11.4-5) pp.120-121 No.2B6
宍戸統悦、岡田 繁、石沢芳夫、工藤邦男、飯泉清賢、奥 正興、
葉 金花、田中雅彦、野木直行、佐原亮二、湯蓋邦男、小島秀伸、
ビジェイ・クマール、野村明子、菅原孝昌、戸澤慎一郎、小原和夫、
大石修治、古曳重美、川添良幸、中嶋一雄
92. 第一原理計算によるメタロセン分子の導電性評価..... 892
第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.11
上原朋樹、五十嵐伸昭、R.V. Belosludov、A. A. Farajian、水関博志、
川添良幸
93. Electronic Mechanism of the Role of Vacancies and in the Elastic Properties of
Perovskite-Type $RERh_3B_x$ with RE = Sc, Y, and La..... 893
第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.19
R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar,
K. Nakajima and Y. Kawazoe
94. トレハロースとグルコースの振動スペクトル:テラヘルツ分光法と
密度汎関数理論計算..... 894
第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.27
高橋まさえ、川添良幸、石川陽一、伊藤弘昌

95. Solvent Effect on Electronic Excitations in Dipolar Ruthenium (II) Ammine Complexes..... 895
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.32
 Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
 Masae Takahashi, Shigeki Saito and Yoshiyuki Kawazoe
96. 第一原理計算による生体医用結晶のテラヘルツ基準振動計算：
 サリチル酸結晶と β -D-グルコース結晶..... 896
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.47
 斎藤繁喜、タルガット M.インネルバエブ、水関博志、川添良幸
97. 第一原理計算による白金合金触媒上でのメタノールの解離に関する
 研究..... 897
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.55
 岡 利昭、水関博志、川添良幸
98. Theoretical Investigation of Transport through a Gated Nanodevice..... 898
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.71
 A.A. Farajian, R.V. Belosludov, T. Hashizume, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
99. Evolution of Electronic Structure and Conductance of DNA and Its Sodium
 Salts under Electric Field: First-Principles Study..... 899
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.74
 O.V. Pupysheva, A.A. Farajian, R.V. Belosludov, H. Mizuseki, and
 Y. Kawazoe
100. DFT Analysis of Spin Polarization Mechanism in Core Region Using an
 All-Electron Mixed Bases Method..... 900
 第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.83
 Mohammad Saeed Bahramy, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

101. Structure and Electronic Properties of ZnO Nanoclusters..... 901
第 110 回東北大学金属材料研究所講演会 (2005 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2005.11.14-15) p.87
Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
102. 液体リチウムブランケットにおける酸化物セラミックスとバナジウムとの
接合強度に関する基礎研究..... 902
プラズマ・核融合学会 第 22 回年会
東京 (2005.11.29-12.2) p.79
垣江道人、佐藤 学、小松孝行、阿部勝憲
103. メタロセン分子の電気導電特性についての理論解析..... 903
応用物理学会東北支部第 60 回学術講演会
秋田大学 (2005.12.8-9)
上原朋樹、五十嵐伸昭、R.V. Belosludov、A.A. Farajian、水関博志、
川添良幸

<2006 年>

1. メタロセン分子の電気的特性についての理論解析..... 905
2006 年ハイパフォーマンスコンピューティングと
計算科学シンポジウム
東京大学 (2006.1.18-19) p.51
上原朋樹、五十嵐伸昭、R.V. Belosludov、A.A. Farajian、水関博志、
川添良幸
2. 拡散量子モンテカルロ法によるフント則成立理由と分子安定性の
正しい評価..... 906
科学研究費補助金 学術創成研究 平成 17 年度全体会議
「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究ー物理学と化学の
真の融合を目指してー」
愛知 (2006.1.30-2.1) p.4
川添良幸、本郷研太、小山田隆行、安原 洋

3. 常識を破るーナノテクで錬金術ー…………… 908
第 6 回 IPAB シンポジウムーバイオナノの可能性を探るー
日本科学未来館(東京)(2006.2.10) pp.23-34 << 基調講演 >>
川添良幸
4. バイオナノはシリコンコンピュータを越えられるか! …………… 919
第 6 回 IPAB シンポジウムーバイオナノの可能性を探るー
東京 (2006.2.10) pp.40-44 << パネルディスカッション >>
小長谷明彦、浦岡行治、川添良幸、陶山 明、鬼塚健太郎
5. ScRh_3B_x ($0 \leq x \leq 1$) の体積弾性率に対する空孔の効果…………… 924
第 4 回ホウ素・ホウ化物研究会
日本大学 (2006.3.4) pp.29-30
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
6. 第一原理計算による $\text{ScNi}_3\text{B}_{0.5}$ の弾性特性評価…………… 926
第 4 回ホウ素・ホウ化物研究会
日本大学 (2006.3.4) pp.50-51
小島秀伸、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
7. バナジウム合金と酸化物セラミックスとの接合における理想界面強度の
計算…………… 928
日本金属学会 2006 春期大会 講演概要
早稲田大学 (2006.3.21-3.23) p.284
佐藤 学、垣江道人、阿部勝憲
8. 第一原理計算による $\text{ScNi}_3\text{B}_{0.5}$ の機械的特性…………… 929
日本金属学会 2006 春期大会 講演概要
早稲田大学 (2006.3.21-3.23) p.460
小島秀伸、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

9. 第一原理計算による希土類ロジウムホウ化物・炭化物の機械的特性・・・ 929
 日本金属学会 2006 春期大会 講演概要
 早稲田大学 (2006.3.21-3.23) p.460
 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
10. 白金合金上における CO の酸化に関する理論研究・・・・・・・・・・・・・・ 929
 日本金属学会 2006 春期大会 講演概要
 早稲田大学 (2006.3.21-3.23) p.461
 岡 利昭、水関博志、川添良幸
11. β -D-Glucopyranose 単分子系・結晶系のテラヘルツ振動モードの
 計算比較・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 930
 2006 年春季第 53 回応用物理学関係連合講演会 予稿集 No.3
 武蔵工業大学 (2006.3.22-26) p.1182 No.25p-M-P
 斎藤繁喜、タルガット M. インネルバエブ、水関博志、五十嵐伸昭、川添良幸
12. The Effect of Aluminium Atom on Structure and Electronic Properties of
 MEH-PPV・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 931
 The 10th Annual National Symposium on Computational Science and
 Engineering (ANSCSE10)
 Chiang Mai, Thailand (2006.3.22-24)
 Apirath Phusittrakool, Sornthep Vannarat, Chanchana Thanachayanont,
 Songwut Suramitr and Supa Hannongbua
13. フント則の起源は何か？・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 932
 日本物理学会第 61 回年次大会
 愛媛大学・松山大学 (2006.3.27-30) p.159 No.28aTB-10
 本郷研太、小山田隆行、川添良幸、安原 洋
14. ナノ超伝導板の渦糸状態の準粒子構造・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 933
 日本物理学会第 61 回年次大会
 愛媛大学・松山大学 (2006.3.27-30) p.707 No.30aXC-13
 末松久孝、加藤 勝、町田昌彦、小山富男、石田武和

15. Ba 充填タイプⅢクラスレートの電子構造..... 934
日本物理学会第 61 回年次大会
愛媛大学・松山大学 (2006.3.27-30) 予稿集第 4 分冊 p.823 No.28aRC-6
赤井光治、古賀健治、松浦 満
16. マルチフェロイック BiCoO_3 , PbVO_3 の第一原理計算..... 935
日本物理学会第 61 回年次大会
愛媛大学・松山大学 (2006.3.27-30) No.27pPSB-1
浦谷佳孝、獅子堂達也、石井史之、小口多美夫

VI. 新聞記事等

1. 『仙台でナノ学会「10億分の1」解説 市民対象に無料講演会』…………… 937
河北新報 (2005.5.11)
2. 『人が大勢集まるところに融合有り』…………… 938
日経ナノテクノロジー PDF plus No.40 p.32 "編集室"より
(2005.5.16)
3. 『銀ナノ粒子で「無鉛はんだ」阪大グループ』…………… 939
朝日新聞 夕刊 (2005.5.24)
4. 『第3回ナノ学会大会開催 医学、薬学、物理学、工学、生物学など広範な
分野から発表』…………… 940
科学新聞 (2005.6.3)
5. 『コンピューターシミュレーションで新物質を創製
—東北大学教授 川添良幸氏に聞く—』…………… 941
日経ナノテクノロジー PDF plus No.44 pp.2-8
"スペシャルフィーチャー"より (2005.7.11)
6. 『日本の共同研究チーム、ナノポーラス金属錯体を用いて安全に
高濃度アセチレン吸着、さらにメカニズムを解析』…………… 948
日経ナノテクノロジー Plus (2005.7.14)
7. 『アセチレンを超高密度濃縮 京大などが多孔材料開発』…………… 950
日刊工業新聞 (2005.7.14)
8. 『日本の共同研究チーム、ナノポーラス金属錯体を用いて安全に
高濃度アセチレン吸着、さらにメカニズムを解析』…………… 951
Tech-On! (2005.7.14)
9. 『高爆発性のアセチレンガス 選択的に安定、高密度濃縮
北川・京大教授らのグループ成功』…………… 952
科学新聞 (2005.7.22)

VII. 雑誌等掲載解説記事

<2003 年>

1. 『東北大学教授 川添良幸先生「本物のナノテクノロジーとは」
ー第一原理計算の進展とナノテクノロジーへの応用ー』…………… 959
第 24 回アクションセミナーレポート JASVA 通信 29 号 (2003.9.11)
2. 『材料研究用第一原理計算プログラム MixedBasis の紹介』…………… 961
日立 TO 技報 第 9 号 (2003) pp.77-83

<2004 年>

1. 『量子力学計算によるナノデバイス要素設計と材料特性予測』…………… 968
京都大学ホームページ (2004.12.6)

<2005 年>

1. 『中国の研究者との交流』…………… 969
IET 東北大学 国際交流タイムズ No.23 (2005.3) p.22
川添良幸
2. 『BN ナノ物質の構造と物性』…………… 970
ナノ学会会報 第 3 巻 第 2 号 (2005.3.31) pp.71-85
奥 健夫、成田一人、西脇篤史、小井成弘、所 久人、藤井重男、
平賀賢二、川添良幸
3. 『錬金術の復活 理論計算で新有用物質設計が可能に』…………… 985
東北大学総合学術博物館ニュースレター
「オムニヴィデンス」No.15 (2005.4)
川添良幸
4. 『新任のご挨拶』…………… 988
金属ガラス総合研究センターニュース Vol. 1 (2005.4.28)
Rodion Vladimirovich BELOSLUDOV

5. 『「ナノ学会 第3回大会」、2005年5月8日から仙台で開催』…………… 989
週刊ナノテク 第1206号 (2005.5.2) p.21
6. 『日本発の製品を世界で売れる仕組みづくりを！
「本物ナノテク」見極めも必要』…………… 990
週刊ナノテク 第1207号 (2005.5.9) p.2
7. 『ナノ学会 第3回大会～ナノテクノロジーの基盤から実用化への道～
発表論文は300件に大幅増加、バイオ系論文も急増』…………… 991
週刊ナノテク 第1207号 (2005.5.9) pp.26-31
8. 『Computational Materials Science-From *Ab Initio* to Monte Carlo Methods』
…………… 993
(Springer, Berlin, 1999) Ohno K, Esfarjani K and Kawazoe Y
Used as Reference in 『Rational Development of New Materials—Putting the
Cart Before Horse?』
M. Jansen and J.C. Schoen, Nature Materials, [3] (2004) p.838
9. 『私の研究観』…………… 994
CAMM NEWS vol. 29 (2005.6.3) pp.1-3
川添良幸
10. 『日本物理学会誌』…………… 997
日本物理学会誌 第60巻 第7号 表紙図 (2005.7.5)
11. 『計算機と私』…………… 998
東北大学情報シナジーセンター 大規模科学計算システム広報
巻頭言 SENAC vol.38 No. 3 (2005.7) p.1-2
川添良幸
12. 『東北大学金属材料研究所 川添研究室の紹介』…………… 1000
日本NAGホームページ (2005.8.26)
13. 『究極の多次元構成キット ZOMETOOL ～ゾムツール～』…………… 1003
(株)イメージミッション木鏡社ホームページ (2005.8.29)

14. 『分子デバイスの可能性』…………… 1006
IMR ニュース KINKEN vol.48 新・研究インデックス (2005.10)
水関博志
15. 『H17 年度前期 客員研究員 研究成果報告』…………… 1007
金属ガラス総合研究センターニュース vol.2 (2005.10.24)
Benjamin P. BURTON
16. 『フント則の起源は何か?』…………… 1008
日本物理学会誌 第 60 巻 第 10 号 (2005) pp.799-803
本郷研太、小山田隆行、川添良幸、安原 洋
17. 『第一原理シミュレーション計算による次世代デバイス設計』…………… 1013
応用物理 第 74 巻 第 8 号 (2005) pp.1033-1038
川添良幸、水関博志
18. 『日本在奈米模擬方面的發展現況』…………… 1019
全球工商 (2005.12) pp.1-2
川添良幸
19. ナノ構造超伝導体とその複合構造の物理…………… 1021
固体物理<超伝導接合の物理と応用>特集号
第 40 巻 第 10 号 (2005) pp.119-130
加藤 勝、石田武和

<2006 年>

1. 『第一原理計算法』…………… 1033
ナノマテリアル工学大系 第 2 巻 ナノ金属 (2006.1.11) pp.448-451
川添良幸
2. 『シリコンフラーレン』…………… 1037
ナノマテリアル工学大系 第 2 巻 ナノ金属 (2006.1.11) pp.845-848
川添良幸

3. 『シリコンフラーレンの発見とナノメディシンへの応用研究』…………… 1041
日本臨牀 第64巻 第2号 (2006.2) pp.221-224
川添良幸
4. 『将来を予測するナノテクノロジー
ーコンピュータの発達と計算科学の貢献』…………… 1045
入門ナノテクビジネス「週刊ナノテク」編集部
(2006.2.23) pp.42-43
5. 『東北大学 川添良幸教授 計算シミュレーションから新規機能性材料を
発見』…………… 1046
入門ナノテクビジネス「週刊ナノテク」編集部
(2006.2.23) pp.157-158
川添良幸
6. 『東北大学ーシミュレーションによる新材料開発から医療応用へ』…………… 1047
入門ナノテクビジネス「週刊ナノテク」編集部
(2006.2.23) pp.168-169
7. 『研究バンザイ！～思うことあれこれ～第一回』…………… 1048
国際技術情報誌 M&E (2006.4.1) p.80
川添良幸

VIII. その他

1. Third Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-3) (2005.9.8-11) Beijing, China..... 1049
2. 川添教授ナノテク講演会 (2005.11.5-6)..... 1050
ラモス元フィリピン大統領と
3. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員..... 1051
4. 計算材料学センター長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧・ 1052
5. 東北大学金属材料研究所構内図..... 1056
6. スーパーコンピューター棟レイアウト図..... 1057