

2006 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

(2006 年 4 月～2007 年 3 月)

目次

『巻頭言』	計算材料学センター長 前川禎通
・計算材料学センターの 13 年	川添良幸
I. 研究内容概要	
1. トレハロース結晶の低波数振動	1
東北大学金属材料研究所 高橋まさえ、川添良幸 独立行政法人理化学研究所フォトダイナミクス研究センター 石川陽一 東北大学電気通信研究所 伊藤弘昌	
2. 強誘電体薄膜の物性研究	6
東北大学金属材料研究所 西松 毅	
3. ペロブスカイト型希土類ロジウムホウ化物(ScRh_3B_x)における体積弾性率の 空孔強化機構	7
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、宍戸統悦、野村明子、 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 岡田 繁 Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar	

4. First-Principles Design of Nanomaterials for Nanomedical Application..... 10
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki, M. Philpott,
 and Y. Kawazoe
 Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
 Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University A. Kasuya
 University of Minnesota Duluth, USA V. Nemykin and R. G. Hadt
 Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia
 V. R. Belosludov

5. Transport Properties of Molecular and Atomic Wires..... 13
 IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Takenobu,
 Y. Iwasa and Y. Kawazoe
 Dep. of Mechanical Engineering and Materials Science,
 Rice University, Houston, Texas, USA A. A. Farajian
 Nanoarchitecture Group, Organic Nanomaterials Center, NIMS, Tsukuba
 K. Miki

6. Study of Point Defects in Tin-Doped Indium Oxide..... 15
 IMR, Tohoku University Talgat. M. Inerbaev

7. From Mo-S Clusters to Assembly of Nanowires..... 21
 IMR, Tohoku University P. Murugan and Yoshiyuki Kawazoe
 Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
 Hitachi Maxell Ltd. Norio Ota

8. ヴェリアル定理にもとづく水素分子の化学結合の解析..... 28
 東北大学金属材料研究所 本郷研太、川添良幸、安原 洋

9. Interconnection of Carbon Nanotubes Using Peptide Linkages: New Types of
 Molecular Diodes..... 30
 IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
 COE Laboratory Tohoku University, IMRAM Fabio Pichierri

10. 第一原理計算による有機分子結晶のテラヘルツフォノンに関する研究... 33
 東北大学金属材料研究所 齋藤繁喜、Talgat M. Inerbaev、水関博志、
 五十嵐伸昭、野手竜之介、川添良幸

11. Calculations of Spin Induced Transport in Ferromagnets..... 38
IMR, Tohoku University M. S. Bahramy, P. Murugan and Y. Kawazoe
Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Kolkata, India
G. P. Das
12. 貴金属及びアルカリ金属クラスターの幾何学的原子構造と電子状態に
関する比較研究..... 41
東北大学金属材料研究所 伊藤正寛
13. First Principles Calculation Study on Catalytic Reaction for Fuel Cells..... 45
Development and Technology Division, Hitachi Maxell, Ltd.
Susumu Imai and Norio Ota
IMR, Tohoku University Palanichamy Murugan and Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
14. Aromatic Duality in the All-Metal Cluster Al_4Li_4 47
IMR, Tohoku University Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
15. Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for the Methylene
Molecule..... 52
IMR, Tohoku University Youhei Maruyama, Kenta Hongo,
Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
Graduate School of Integrated Science, Yokohama City Univ.
Masanori Tachikawa
16. 拡散モンテカルロ法による原子系列の Hund 則解釈の研究..... 53
東北大学金属材料研究所 小山田隆行、本郷研太、川添良幸、安原 洋
17. ボライドを対象とした機械的特性の理論研究..... 56
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
神奈川大学工学部 工藤邦男
国士舘大学工学部 岡田 繁
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar

18. ケイ素およびゲルマニウムイオン性クラスターの安定構造の理論計算・・・ 60
 東北大学金属材料研究所 菊地英樹、高橋まさえ、川添良幸
19. シリル化ホスファアルケンのホモカップリング反応に関する理論的研究・・・ 63
 東北大学金属材料研究所 平林亨一、高橋まさえ、川添良幸
 東北大学大学院理学研究科 伊藤繁和
20. ホスファアレン二量化反応機構の理論的研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 65
 東北大学金属材料研究所 廣瀬大輔、高橋まさえ、川添良幸
 東北大学大学院理学研究科 伊藤繁和
21. Molecular Electronics and Bioinorganic Materials.・・・・・・・・・・・・ 67
 IMR, Tohoku University Michael R Philpott
22. First Principles Phase Diagram Calculations for the System $\text{NaNbO}_3\text{-KNbO}_3$:
 can spinodal decomposition generate relaxor ferroelectricity?・・・・・・・・・・・・ 69
 Materials Science and Engineering Laboratory, Ceramics Division National
 Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, USA B. P. Burton
 IMR, Tohoku University Takeshi Nishimatsu
23. Physical and Chemical Properties of Gas Hydrates: Theoretical Aspects of
 Energy Storage Application・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 77
 Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin and D. S. Krupskii
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
 Research Institute for Computational Sciences, AIST, Tsukuba T. Ikeshoji
 Center for Northeast Asia Studies of Tohoku University J. Kudoh
24. 密度汎関数理論を超えた全電子第一原理 GW 計算と
 光吸収スペクトル計算・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 79
 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

25. Two-Stage Rotation Mechanism for Group-V Precursor Dissociation on Si(001)..... 81
 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China
 Jian-Tao Wang, E. G. Wang and Ding-Sheng Wang
 Dep. of Physics, University of Nevada, Las Vegas, USA C. F. Chen
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
26. Simulation on Magnetic Nanostructures in Biomedical Applications..... 82
 Dep. of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qiang Sun and Qian Wang
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
27. *Ab Initio* Study of Ferromagnetism in Cr-doped GaN Nanotubes and Nanohole Arrays..... 83
 Dep. of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qian Wang and Qiang Sun
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
28. Oscillatory Convection in Czochralski Model..... 88
 Dep. of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing China
 Zhong Zeng
 IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
29. Longitudinal Charge Transport through DNA..... 91
 Dep. of Mechanical Engineering and Materials Science, Rice University,
 Houston, USA Olga V. Pupysheva and Amir A. Farajian
 IMR, Tohoku University Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe
30. Gate-Induced Switching and Negative Differential Resistance in a Single-Molecule Transistor..... 93
 Dep. of Mechanical Engineering and Materials Science, Rice University,
 Houston, USA A. A. Farajian and B. I. Yakobson
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
 Advanced Research Laboratory, Hitachi Ltd. T. Hashizume

31. Structures, Energetics and Stability of Normal, N-Confused and Core Modified Sapphyrins..... 95
 Bhabha Atomic Research Center, Trombay, Mumbai, India
 C. Rajesh and C. Majumder
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
32. Progress Report on *Ab Initio* Study of GaAs Clusters..... 102
 National University of Singapore Yuan Ping Feng
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
33. Progress Report on *Ab Initio* Study of NiO Clusters..... 103
 National University of Singapore Yuan Ping Feng
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
34. Magneto-Optical Kerr Effects of Half-Metallic Ferromagnetic Transition Metal Chalcogenides in Zinc-Blende and Wurtzite Structures..... 104
 IMR, Tohoku University Hongming Weng and Yoshiyuki Kawazoe
 Dep. of Physics, Nanjing University Jinming Dong
35. Magnetic Circular Dichroism Spectra in a II-VI Diluted Magnetic Semiconductor $Zn_{1-x}Cr_xTe$: First-Principles Calculations..... 106
 IMR, Tohoku University Hongming Weng, Tomoteru Fukumura,
 Masashi Kawasaki and Yoshiyuki Kawazoe
 Dep. of Physics, Nanjing University Jinming Dong
36. Electronic Structures and Optical Properties of Layered Perovskites Sr_2MO_4 (M=Ti, V, Cr, and Mn): An *Ab Initio* Study..... 108
 IMR, Tohoku University Hongming Weng and Yoshiyuki Kawazoe
 Dep. of Physics, Nanjing University Xiangang Wan and Jinming Dong
37. The Adsorption of Small Molecules on Ti-Benzene Complexes..... 110
 Dep. of Physics, Virginia Commonwealth University,
 Richmond, Virginia, USA G. Chen and P. Jena
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe

38. 遷移金属クラスターの非稠密構造と水素吸着…………… 119
株式会社コーデック 斐 栄造、長内弘喜
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
東北大学金属材料研究所 川添良幸
39. 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…………… 121
秋田工業高等専門学校 桜田良治
University of Texas Tina Marie Briere
University of California Abhishek Kumar Singh
東北大学金属材料研究所 川添良幸
40. 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 川添良幸
41. 分光法による水の活量の測定…………… 126
東北大学大学院工学研究科材料システム工学専攻 最上譲二、
宮崎 崇、鈴木 誠
東北大学金属材料研究所 川添良幸
42. クロム3量体イオンの光解離分光…………… 128
株式会社コンボン研究所 間嶋拓也
東京理科大学理学部 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
43. 並列アルゴリズムによるナノクラスター量安定構造の探索…………… 129
弘前大学工学部電子情報工学科 種田晃人
東北大学金属材料研究所 川添良幸
44. 凝縮系中のナノ構造微細制御による機能発現…………… 130
山口大学メディア基盤センター 赤井光治
山口大学大学院理工学研究科 仙田康浩、嶋村修二
山口東京理科大学基礎工学部 古賀健治、
宇部工業高専 高木英俊
放送大学山口学習センター 松浦 満
東北大学金属材料研究所 川添良幸

45. 第一原理計算による塩素終端シリコン表面の欠陥構造の研究…………… 133
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
46. 第一原理計算による遷移金属内包フラーレンの電子状態と磁性の研究・ 135
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
47. 二次元三角格子ハバード模型の電荷励起に対するフラストレーションの
効果…………… 136
京都大学基礎物理学研究所 遠山貴巳
48. 超伝導微細系の数値シミュレーション…………… 137
大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 末松久孝
大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 加藤 勝
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
大阪府立大学大学院工学研究科電子物理工学 石田武和
49. 微小異方的超伝導体の超伝導構造…………… 140
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
日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 町田昌彦
大阪府立大学大学院工学研究科電子物理工学 石田武和
50. 超伝導ネットワークの数値シミュレーション…………… 144
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
51. Kinetics Driven Growth of Pentacene…………… 145
IMR, Tohoku University A. Al-Mahboob, J. T. Sadowski, Y. Fujikawa and
T. Sakurai
52. アミドの配位子としての機能の理論計算による検討…………… 147
東北大学金属材料研究所 山村朝雄、吉田 裕、塩川佳伸

53. 第一原理計算による2元系 CuZr 金属ガラスの原子構造と剛性率…………… 150
東北大学金属材料研究所 藤田武志
54. Probing Deformation-Induced Microstructural Evolution and Its Influence on Successive Deformation of Nanocrystalline Materials Using Multistep Nanoindentation…………… 153
IFCAM, IMR, Tohoku University Deng Pan and Mingwei Chen
Dep. of Aeronautics and Space Engineering Tohoku University
Ahmed Elmarakbi and Ning Hu
55. 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…………… 159
東北大学大学院工学研究科 佐藤 学、山川隼人、阿部勝憲
東北大学金属材料研究所 長谷川雅幸
56. 有限要素法による Nb₃Sn 複合超伝導線の事前曲げ歪効果の三次元解析…………… 163
岡山大学自然科学研究所 村瀬 暁、岡田一星、金 錫範、七戸 希
東北大学金属材料研究所 淡路 智、小黒英俊、西島 元、渡辺和雄
高エネルギー加速器機構 和気正芳
57. 有限要素法を用いた GaN/サファイヤヘテロ構造における残留熱応力解析に関する中間報告…………… 169
東北大学学際科学国際高等研究センター 後藤裕輝、曹 明煥、八百隆文
58. テトラセン単結晶の両極性発光トランジスタ…………… 171
東北大学金属材料研究所 高橋哲生、竹延大志、下谷秀和、岩佐義弘
大阪大学大学院理学研究科 竹谷純一
59. ニオブ酸リチウム融液のイオン性とそれに起因する結晶化起電力…………… 172
東北大学金属材料研究所 黄 晋二、木村博充、中村洪大、宇田 聡、黄 新明

60. 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・・・ 173

大阪府立大学大学院工学研究科 塚田隆夫、Chengjun Jing

独立行政法人物質・材料研究機構 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

<2006 年>

1. Clustering of Cr in GaN Nanotubes and the Onset of Ferrimagnetic Order..... 177
Phys. Rev. B, 73[20] (2006) pp.2053201-2053206
Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe
2. Electron Affinities and Ionization Potentials of 4d and 5d Transition Metal Atoms by CCSD(T), MP2 and Density Functional Theory..... 183
Chem. Phys. Lett., 423 (2006) pp.81-86
Z. J. Wu and Y. Kawazoe
3. Bonding Nature and Magnetism in Small MoX₂ (X = O and S) Clusters – A Comparative Study by First Principles Calculations..... 189
Chem. Phys. Lett., 423 (2006) pp.202-207
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
4. Alchemy at the Nanoscale: Magic Heteroatom Clusters and Assemblies... 195
Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.1-11
Vijay Kumar
5. A First Principles Study of the Elastic Properties in Perovskite-Type RRh₃B and RRh₃C with R = Sc, Y and La..... 206
Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.12-16
R. Sahara, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar, K. Nakajima and Y. Kawazoe
6. Theoretical Study of Polarons and Self-Trapped Excited States in One-Dimensional C₆₀ Crystal..... 211
Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.17-25
V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh
7. Theoretical Proposal of Planar Silicon Oligomer and Silicon Benzene..... 220
Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.30-35
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

8. Dilute Magnetic III-V Semiconductor Spintronics Materials: A First-Principles Approach..... 226
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.84-90
 G. P. Das, B. K. Rao, P. Jena and Y. Kawazoe

9. First-Principles Calculations of Optical Absorption Spectra of Atoms in the Vacuum and Crystals..... 233
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.125-129
 Kaoru Ohno, Miou Furuya, Soh Ishii, Yoshifumi Noguchi, Shohei Iwata, Yoshiyuki Kawazoe, Shinichiro Nagasaka, Takehisa Yoshinari and Yoshio Takahashi

10. Realization of Molecular Interconnection for Molecular Electronics: Theoretical Aspects..... 238
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.130-134
 R. V. Belosludov, A. A. Farajian, Y. Kikuchi, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

11. Dynamic Formation Process of Bi Line Structure on Si(100) Surface..... 243
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.135-138
 Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang, En-Ge Wang, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Masamichi Naitoh and Satoshi Nishigaki

12. Cs Doping Effects on Electronics Structure of Thin Nanotubes..... 247
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.152-158
 Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

13. First Principles Studies of Magnesium Oxide Clusters by Parallelized Tohoku University Mixed-Basis Program TOMBO..... 254
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.171-175
 Amit Jain, Vijay Kumar, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

14. Dynamics and Equation of State of Hydrogen Clathrate Hydrate as a Function of Cage Occupation..... 259
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.229-233
 Talgat M. Inerbaev, Vladimir R. Belosludov, Rodion V. Belosludov, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

15. Modelling of the Structure and Vibrational Properties of LDA, HDA, and VHDA Amorphous Ices..... 264
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.253-257
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, T. M. Inerbaev, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

16. Ring Structures of Small ZnO Clusters..... 269
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.258-262
 Amit Jain, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

17. Terahertz Vibrational Modes of Crystalline Salicylic Acid by Numerical Model Using Periodic Density Functional Theory..... 274
 Jpn. J. of Appl. Phys., 45[5A] (2006) pp.4170-4175
 Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi and Yoshiyuki Kawazoe

18. Terahertz Phonon Modes of an Intermolecular Network of Hydrogen Bonds in an Anhydrous β -D-Glucopyranose Crystal..... 280
 Chem. Phys. Lett., 423 (2006) pp.439-444
 Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe

19. Theoretical Study of Conductance Properties of Metallocene..... 286
 J. Jpn. Inst. Metals., 70[6] (2006) pp.478-482 (in Japanese)
 Tomoki Uehara, Nobuaki Igarashi, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

20. Activation Barriers of CO Oxidation on Pt-M (M=Ru, Sn) Alloys..... 291
 J. Jpn. Inst. Metals., 70[6] (2006) pp.495-499 (in Japanese)
 Toshiaki Oka, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

21. The Influence of Correlation on the Interpretation of Hund's Multiplicity Rule: A Quantum Monte Carlo Study..... 296
 J. Chem. Phys., 125[1] (2006) pp.0141011-0141019
 Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

22. Two-Stage Rotation Mechanism for Group-V Precursor Dissociation on Si(001)..... 305
 Phys. Rev. Lett., 97[4] (2006) pp.0461031-0461034
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, E.G. Wang, Ding-Sheng Wang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
23. First Excited State Properties and Static Hyperpolarizability of Ruthenium (II) Ammine Complexes..... 309
 J. Chem Theory Comput., 2[5] (2006) pp.1325-1334
 Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
24. Low-Frequency Vibrations of Crystalline α,α -Trehalose Dihydrate..... 319
 Chem. Phys. Lett., 429 (2006) pp.371-377
 Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe, Yoichi Ishikawa and Hiromasa Ito
25. Magneto-Optical Kerr Effects of Half-Metallic Ferromagnetic Transition Metal Chalcogenides in Zinc-Blende and Wurtzite Structures..... 326
 Phys. Rev. B, 74[8] (2006) pp.852051-852056
 Hongming Weng, Yoshiyuki Kawazoe and Jinming Dong
26. Self-Consistent Study of Single Molecular Transistor Modulated by Transverse Field..... 332
 J. Chem. Phys., 125 (2006) pp.847101-847106
 F. Jiang, Y. X. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. Transition between N- and Z-Shaped Current-Voltage Characteristics in Semiconductor Multiple-Quantum-Well Structures..... 338
 J. Appl. Phys., 100[3] (2006) pp.0337181-0337189
 O.V. Pupyshva, A.V. Dmitriev, A.A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
28. Mechanism of the Increase in Bulk Modulus of Perovskite ScRh_3B_x by Vacancies..... 347
 Phys. Rev. B, 73[18] (2006) pp.1841021-1841029
 Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe

29. Effects of Morphology and Doping on the Electronic and Structural Properties of Hydrogenated Silicon Nanowires..... 356
 Nano Letters, 6[5] (2006) pp.920-925
 Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe
30. Effect of Au Coating on the Magnetic and Structural Properties of Fe Nanoclusters for Use in Biomedical Applications: A Density-Functional Theory Study..... 362
 Phys. Rev. B, 73[13] (2006) pp.1344091-1344096
 Q. Sun, A.K. Kandalam, Q. Wang, P. Jena, Y. Kawazoe and M. Marquez
31. Defect Structure of Nonstoichiometric Plutonium Oxide..... 368
 J. Phys. Soc. Jpn., 75 (2006) pp.143-145
 K. Konashi, H. Matsui, Y. Kawazoe, M. Kato and S. Minamoto
32. The Electronic Structure of the Dizinocene Core..... 371
 Chem. Phys., 327 (2006) pp.283-290
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
33. Magnetic Circular Dichroism Spectra in a II-VI Diluted Magnetic Semiconductor $Zn_{1-x}Cr_xTe$: First-Principles Calculations..... 379
 Phys. Rev. B, 74[11] (2006) pp.1152011-1152015
 Hongming Weng, Jinming Dong, Tomoteru Fukumura, Masashi Kawasaki and Yoshiyuki Kawazoe
34. Charged and Magnetic Fullerenes of Silicon by Metal Encapsulation: Predictions from *ab initio* Calculations..... 384
 Phys. Rev. B, 74[12] (2006) pp.1254111-1254115
 Vijay Kumar, Abhishek Kumar Singh and Yoshiyuki Kawazoe
35. First Principles Calculation of Terahertz Vibrational Modes of a Disaccharide Monohydrate Crystal of Lactose..... 389
 Jpn. J. Appl. Phys., 45[43] (2006) pp.L1156-L1158
 Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe

36. Theoretical Investigation of Stable Structures of Ge₆ Clusters with Various Negative Charges 392
Mater. Trans., 47[11] (2006) pp.2624-2628
Hideki Kikuchi, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
37. All-Electron *GW* Calculation for Quasiparticle Energies in C₆₀ 397
Mater. Trans., 47[11] (2006) pp.2620-2623
Hitoshi Adachi, Soh Ishii, Kaoru Ohno, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe
38. Boron Nonstoichiometry, Hardness and Oxidation Resistance of Perovskite-Type CeRh₃B_x(x=0-1) 401
J. Alloy. Compd., 426 (2006) pp.304-307
T. Shishido, M. Oku, J. Ye, S. Okada, K. Kudou, K. Iizumi, Y. Sawada, Y. Ishizawa, A. Nomura, T. Sugawara, K. Obara, R. Sahara, K. Yubuta, H. Kojima, V. Kumar, M. Tanaka, K. Shimamura, S. Oishi, S. Kohiki, Y. Kawazoe and K. Nakajima
39. Structural and Magnetic Stabilities of Cubic and Orthorhombic Phases of CeMnNi₄ 405
Appl. Phys. Lett., 89 (2006) pp.2225021-2225023
P. Murugan, Abhishek Kumar Singh, G. P. Das and Yoshiyuki Kawazoe
40. First-Principles Study of Phenyl Ethylene Oligomers as Current-Switch 408
Phys. Lett. A, 359 (2006) pp. 487-493
F. Jiang, Y. X. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
41. Electronic Structure and Optical Properties of Layered Perovskites Sr₂MO₄ (M=Ti, V, Cr, and Mn) : An *ab initio* Study 415
Phys. Rev. B, 74[20] (2006) pp. 2051121-2051129
Hongming Weng, Y. Kawazoe, Xiangang Wan and Jinming Dong
42. First-Principles Calculations of the Far-infrared Absorption Spectrum of 4'-Dimethylamino-N-Methyl-4-Stilbazolium Tosylate 424
Chem. Phys. Lett., 432[1-3] (2006) pp. 157-162
Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe

43. Excited State Properties and Quadratic Optical Nonlinearities in Charged Organic Chromophores: Theoretical Analysis..... 430
 J. Chem. Phys., 125 (2006) pp.2347021-2347028
 Talgat M. Inerbaev, Shigeki Saito, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Masae Takahashi, and Yoshiyuki Kawazoe
44. Vacancy Induced Structural and Magnetic Transition in $MnCo_{1-x}Ge$ 438
 Appl. Phys. Lett., 89 (2006) pp.2625041-2625043
 Jian-Tao Wang, Ding-Sheng Wang, Changfeng Chen, O. Nashima, T. Kanomata, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
45. Surface and Bulklike Phonon Modes of Si(100) Nanometer Thin Film..... 441
 Chem. Phys. Lett., 433 (2006) pp.86-90
 Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note, and Yoshiyuki Kawazoe
46. Diffusion Monte Carlo Study of Atomic Systems from Li to Ne..... 446
 Mater. Trans., 47[11] (2006) pp.2612-2616
 Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
47. Quantum Monte Carlo Study of Electron Correlation in Chromium-Doped Silicon Cluster $Cr@Si_{12}$ 451
 Mater. Trans., 47[11] (2006) pp.2617-2619
 Kenta Hongo, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
48. Geometries and Electronic Properties of Ta_n , Ta_nO and TaO_n ($n=1-3$) Clusters..... 454
 J. Molecular Structure-THEOCHEM, 764[1-3] (2006) pp.123-132
 Z. J. Wu, Yoshiyuki Kawazoe and J. Meng
49. Using First-Principles Results to Calculate Finite-Temperature Thermodynamic Properties of the Nb-Ni μ Phase in the Bragg-Williams Approximation..... 464
 Philo. Mag., 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

50. Electronic Structure of Dimetalocene Molecules: Dizincocene
 $Zn_2(h^5-C_5Me_5)_2$ 475
 J. Molecular Structure: THEOCHEM. 773 [1-3] (2006) pp.43-52
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
51. Evolution of the Dizincocene Metal-Metal Bond in the Series Zn_2L_2 where
 $L = H, CH_3, F, h^5-C_5H_5$ 485
 J. Molecular Structure: THEOCHEM. 776 (2006) pp.113-123
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
52. A d -dot As an Element of Superconducting Devices 496
 J. Korean Phys. Soc., 48[5] (2006) pp.1074-1079
 Masaru Kato, Hisataka Suematsu, Masaki Hirayama, Tomio Koyama,
 Masahiko Machida and Takekazu Ishida
53. Quasi-Particle Spectrum of the Nano-Scaled Anisotropic Superconducting
 Plate 502
 Physica C, 437-438 (2006) pp.132-135
 Masaru Kato, Hisataka Suematsu, Masahiko Machida, Tomio Koyama
 and Takekazu Ishida
54. The Interaction between Square d -dot's 506
 Physica C, 445-448 (2006) pp.264-269
 M. Hirayama, M. Kato, M. Machida, T. Koyama and T. Ishida
55. Nano-Scaled Anisotropic Superconductors 512
 Physica C, 445-448 (2006) pp.270-273
 Masaru Kato, Tomio Koyama, Masahiko Machida and Takekazu Ishida
56. Self-Consistent Solution of the Bogoliubov-de Gennes Equation for a Single
 Vortex in f -wave Superconductors: Application to Sr_2RuO_4 516
 AIP Conference Proceedings (24th International Conference on Low
 Temperature Physics), 850 (2006) pp.579-580
 Masaru Kato, Hisataka Suematsu and Kazumi Maki

57. Physical Properties of Composite Structures of *d*- and *s*-wave Superconductors (*d*-dot's)..... 518
 AIP Conference Proceedings (24th International Conference on Low Temperature Physics), 850 (2006) pp.781-782
 Masaru Kato, Masaki Hirayama, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida
58. Field-Induced Transitions in a Single Crystal of ErZn₂..... 520
 J. Phys.: Conference Series, 51 (2006) pp.131-134
 T. Kitai, H. Yoshida, S. Abe, T. Kawae, T. Kaneko and Y. Kawazoe
59. Study of the Mechanism of Crystallization Electromotive Force During Growth of Congruent LiNbO₃ Using a Micro-Pulling-Down Method..... 524
 J. Cryst. Growth, 297 (2006) pp.247-258
 Shinji Koh, Satoshi Uda, Masahiro Nishida and Xinming Huang
60. Effect of Frustration on Charge Dynamics for a Doped Two-Dimensional Triangular Hubbard Lattice: Comparison with a Square Lattice..... 536
 Phys. Rev. B, 74 (2006) pp.1131081-1131084
 T. Tohyama

<2007 年>

1. Structural and Electronic Properties of Al₁₂X⁺ (X=C, Si, Ge, Sn, and Pb) Clusters..... 540
 J. Chem. Phys., 126[1] (2007) pp.0147031-0147035
 G. Chen, and Y. Kawazoe
2. Electronic Rule for Formation of Glassy Alloys..... 545
 Appl. Phys. Lett., 90 (2007) pp.0731141-0731143
 Mikio Fukuhara, Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe and Akihisa Inoue
3. Calculations of Spin-induced Transport in Ferromagnets..... 548
 Phys. Rev. B, 75[5] (2007) pp.0544041-0544045
 M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe

4. Interpreting STM Image and Tunneling-Current-Induced Rotation of *cis*-2-butene on a Pd(110) Surface..... 553
Chem. Phys. Lett., 435[1-3] (2007) pp.90-95
Sang Uck Lee, Young-Kyu Han, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

5. Diffusion Monte Carlo Study of Correlation in the Hydrogen Molecule... 559
Int. J. Quantum Chem., 107[6] (2007) pp.1459-1467
Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

6. *Ab Initio* Study of the Change from η^5 - to η^1 -Coordination in Group 12 Dimetallocenes $MM'(C_5H_5)_2$ with M, M' = Zn, Cd, Hg..... 568
Chem. Phys., 333 (2007) pp.201-207
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

7. Correct Interpretation of Hund's Rule and Chemical Bonding Based on the Virial Theorem..... 575
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.662-665
Kenta Hongo, Takayuki Oyamada, Youhei Maruyama, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

8. Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for Atoms and Molecules..... 579
J. Magn. Magn, Mater., 310[2] (2007) pp.e560-e562
Kenta Hongo, Takayuki Oyamada, Youhei Maruyama, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

9. Ferromagnetic to Ferrimagnetic Crossover in Cr-doped GaN Nanohole Arrays..... 502
Phys. Rev. B, 75 (2007) pp.0753121-0753127
Q. Wang, Q. Sun, P. Jena, and Y. Kawazoe

10. *Ab-initio* Study of Giant Moment Reduction of Fe Impurity in Dilute $Pd_{0.95}V_{0.05}$ 502
J. Magn. Magn, Mater., 310[2] (2007) pp.e541-e543
M. S. Bahramy, S. K. Srivastava, S. N. Mishra. G. P. Das and Y. Kawazoe

11. Neutron Diffraction Studies on Pseudobinary Compounds $\text{Cr}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sb}_2$
($x = 0.05$ and 0.2) 592
J. Magn. Magn, Mater., 310[2] (2007) pp.1569-1571
T. Harada, Y. Takahashi, Y. Yamaguchi, T. Kanomata, H. Yoshida, T. Kaneko
and Y. Kawazoe

12. Magnetic Properties of RCu_4Ag ($\text{R} = \text{Gd-Er}$) Single Crystals..... 595
J. Magn. Magn, Mater., 310[2] (2007) pp.e583-e585
T. Kitai, S. Abe, H. Yoshida, T. Kawae, Y. Kawazoe and T. Kaneko

13. Understanding the Structural Stability of Compound Mo-S Clusters at
Sub-Nanometer Level..... 598
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.658-661
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota

14. Interstitial Oxygen and Dopant Atoms Arrangement in Tin-Doped Indium
Oxide..... 602
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.666-669
Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe
and Takashi Nakamura

15. Electronic Structure and Thermoelectric Properties of Noble Metal Clathrates:
 $\text{Ba}_8\text{M}_6\text{Ge}_{40}$ ($\text{M} = \text{Cu, Ag, Au}$)..... 606
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.684-688
Koji Akai, Kenji Koga and Mitsuru Matsuura

16. Metal Sandwich Molecules: Planar Metal Atom Arrays between Aromatic
Hydrocarbons..... 611
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.693-699
Michael R Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

17. Physical and Chemical Properties of Gas Hydrates: Theoretical Aspects of
Energy Storage Application..... 618
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.704-710
Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Dmitrii S. Krupskii,
Rodion V. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe and Jun-ichi Kudoh

18. Structure and Stability of the Frank-Kasper $W@Si_{12}$, and $Ti@Si_{15}$ and $Ti@Si_{16}$ Clusters..... 625
Mater. Trans., 48[4] (2007) pp.745-747
Marian W. Radny and Yoshiyuki Kawazoe
19. Artificial Spin System Using Composite Structures of d- and s-wave superconductors..... 628
J. Magn. Magn, Mater., 310[2] (2007) pp.495-497
Masaru Kato, Masaki Hirayama, Susumu Nakajima, Tomio Koyama, Masahiko Machida and Takekazu Ishida
20. Effects of Cs Treatment on Field Emission Properties of Capped Carbon Nanotubes..... 631
Surface Sci., 601 (2007) pp.1501-1506
Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
21. Electronic and Transport Properties of Bismuth Nanolines for Applications in Molecular Electronics..... 637
Phys. Rev. B, 75 (2007) pp.1134111-1134114
R. V. Belosludov, A. A. Farajian, H. Mizuseki, K. Miki and Y. Kawazoe

III. 原著論文

<2006 年>

1. Sign of Superexchange Interaction in TiO_2 (rutile) Doped With Impurity Pairs..... 641
Institute of Advanced Studies @ NTU Workshop on Spintronics
Nanyang Technical University, Singapore (2006.5.8-12)
P. Murugan
2. *Ab initio* Quantum Chemical Investigation of Several Isomers of Anionic Si_6 642
XIIth International Congress of Quantum Chemistry
Kyoto, Japan (2006.5.21-26) No. A005
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
3. The Mechanism of Photochemical 1,3-Silyl Migration of Allylsilane..... 643
XIIth International Congress of Quantum Chemistry
Kyoto, Japan (2006.5.21-26) No. C049
Masae Takahashi
4. Electronic and Structural Properties of Novel CdSe-Based Quantum Dots for Application in Nanomedicine..... 644
3rd IUPAC-sponsored International Symposium on Macro- and Supramolecular Architectures and Materials (MAM-06):
Practical Nano-Chemistry and Novel Approaches
Waseda, Tokyo, Japan (2006.5.28-6.1) No. Pb-022 (Poster)
R. V. Belosludov, V. Kumar, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe
5. First-Principles Calculations of Hyperfine Field and Magnetic Moment of Fe Impurity in Dilute Pd-V Alloys..... 645
Sixth Seeheim Workshop on Mössbauer Spectroscopy
Seeheim, Germany (2006.6.7-11) No.P-32
M. S. Bahramy, G. P. Das and Y. Kawazoe

6. Transport Properties of Porphyrin and Phthalocyanine: a Theoretical Approach..... 646
 4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-4)
 Rome, Italy (2006.7.2-7) p.773
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and
 Yoshiyuki Kawazoe

7. Modelling of the Vertical Excitation Energies in the Structural Isomers of Pyridinoporphyrazines and Their Structural Analogues Using TDDFT, PCM-TDDFT, ZINDO/S, and PM3 Methods..... 647
 4th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-4)
 Rome, Italy (2006.7.2-7) p.792
 Victor N. Nemykin, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, and
 Yoshiyuki Kawazoe

8. Electronic and Structural Properties of Novel Quantum Dots for Application to Early Cancer Diagnostics..... 648
 International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (ICONN06)
 Brisbane, Queensland, Australia (2006.7.3-7) pp.138-139 (Oral)
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Vijay Kumar, Atsuo Kasuya,
 Michael Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

9. Theoretical Study of Transport in Nano-Scale Systems for Molecular Wire Application..... 650
 International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (ICONN06)
 Brisbane, Queensland, Australia (2006.7.3-7) pp.343-344 (Oral)
 Rodion Belosludov, Amir Farajian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

10. Superconducting Symmetries and Vortex Structures of Nano-structured Anisotropic Superconductors..... 652
 Nanoscale Superconductivity and Magnetism - NSM2006
 Lauven, Vaalbeek, Belgium (2006.7.6-8) No.P1-VnS09
 Masaru Kato, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida

11. Vortex Structures of Nanostructured Anisotropic Superconductors····· 653
 The 8th International Conference on Materials of Superconductivity and High
 Temperature Superconductors (M2S-HTSC-VIII)
 Dresden, Germany (2006.7.9-14) p.126 No.P-MoI-18
 Masaru Kato, Masahiko Machida, Tomio Koyama and Takekazu Ishida

12. Infrared Photodissociation Spectroscopy of $\text{Ni}_n^+(\text{CH}_3\text{OH})_m$ Produced by the
 Collision of Small Nickel Cluster Ions with Methanol····· 654
 13th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters
 (ISSPIC XIII)
 Goteborg, Sweden (2006.7.23-28)
 Shinichi Hirabayashi, Ryuji Okawa, Masahiko Ichihashi and
 Tamotsu Kondow

13. Photodissociation Spectroscopy of the Chromium Dimer and Trimer
 Ions····· 655
 13th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters
 (ISSPIC XIII)
 Goteborg, Sweden (2006.7.23-28) Poster No.A-01-34
 T. Majima, K. Tono, A. Terasaki and T. Kondow

14. Band Structure and Thermoelectric Properties of Na_xCoO_2 ····· 656
 25th International Conference on Thermoelectrics (ICT-2006)
 Vienna, Austria (2006.8.6-10) pp.611-613
 G. J. Zhao, K. Akai and M. Matsuura

15. Band Structure and Thermoelectric Properties of Type-III Barium
 Clathrates····· 659
 25th International Conference on Thermoelectrics (ICT-2006)
 Vienna, Austria (2006.8.6-10) pp.614-617
 K. Akai, K. Koga and M. Matsuura

16. First-Principles Investigation of CeMnNi_4 : A New Class of Soft Ferromagnetic Intermetallic Compound..... 663
 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV) No.PB-41
 Sendai, Japan (2006. 8.15-18)
 P. Murugan, Abhishek Kumar Singh, Gour P. Das and Yoshiyuki Kawazoe
17. Control of Mixing Water Content and Durability of Concrete..... 664
 31st Conference on Our World in Concrete & Structures
 Singapore (2006.8.16-17) pp.337-344
 R. Sakurada and Y. Kawazoe
18. Bending Behavior of RC Beam Reinforced with Braided Aramid FRP Bar..... 672
 31st Conference on Our World in Concrete & Structures
 Singapore (2006.8.16-17) pp.345-352
 R. Sakurada, T. Shimomura, K. Maruyama and S. Matsubara
19. Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for Atoms and Molecules..... 680
 International Conference on Magnetism (ICM2006)
 Kyoto, Japan (2006.8.20-25)
 K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyama, Y. Kawazoe and H. Yasuhara
20. Three-directional FEM Analysis of Pre-bending Effects for Nb_3Sn Composite Wires..... 681
 2006 Applied Superconductivity Conference (ASC2006)
 Seattle, USA (2006.8.27-9.1) No. 4MK03
 S. Murase, K. Kiyama, N. Nanato, S. B. Kim, H. Oguro, G. Nishijima, S. Awaji, K. Watanabe and M. Wake
21. Basic Properties and Applications of Composite Structures of d- and s-wave Superconductors; d-dot..... 682
 International Workshop on Mesoscopic Superconductivity and Magnetism (MesoSuperMag2006)
 Chicago, USA (2006.8.28-9.1) p.82 (Oral)
 Masaru Kato, Tomio Koyama, Masahiko Machida and Takekazu Ishida

22. 物質形成基本理論的理解與 奈米科技的實現 利用超級電腦的結果可以改寫教科書的常識！～庫倫多體系的本質與超大規模計算～…………… 683
2006 台日科技高峰論壇 台北 (2006.9.5-6) No.13-1-13-15 (Invited talk)
川添良幸
23. Transport Properties of Nanoscale Systems for Molecular Electronics Application…………… 699
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Inv-8 (Invited talk)
Hiroshi Mizuseki, Tomoki Uehara, Rodion V. Belosludov, Sang Uck Lee, Amir A. Farajian, and Yoshiyuki Kawazoe
24. Electronic Structures of Polar Oxide Heterointerfaces…………… 700
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Inv-12 (Invited talk)
A. Ohtomo, P. Murugan, T. Nishimatsu, Y. Kawazoe and M. Kawasaki
25. Synthesis and Structures of Boron Nitride Nanotubes…………… 701
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Oral-4 (Oral)
Takeo Oku, Naruhiro Koi, Katsuaki Suganuma, Rodion V. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe
26. Correct Interpretation of Hund's Rule and Chemical Bonding Based on the Virial Theorem…………… 702
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Oral-9 (Oral)
Kenta Hongo, Takayuki Oyamada, Youhei Maruyama, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

27. Quantum-Chemical Design of Covalent Linkages for Interconnecting Carbon Nanotubes..... 703
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Oral-10 (Oral)
Fabio Pichierri, Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe
28. Induced Magnetization in Cobalt/Palladium Multilayer Thin Films..... 704
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Oral-15 (Oral)
Susumu Imai, Norio Ota, P. Murugan and Yoshiyuki Kawazoe
29. Band Structure and Thermoelectric Properties of Nano-cage Lattice Systems: Group-IV Based Clathrates..... 705
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.Oral-18 (Oral)
K. Akai, K. Koga, H. Takagi and M. Matsuura
30. Stability of Open Structures of Transition Metal Clusters..... 706
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-4 (Poster)
Young-Cho Bae, Vijay Kumar, Masahiro Itoh, Hiroki Osanai and Yoshiyuki Kawazoe
31. Electronic Structure and Thermoelectric Properties of Eu Substituted Clathrate Compounds..... 707
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-13 (Poster)
K. Koga, T. Tanaka, K. Akai, T. Uemura, H. Takagi, H. Anno and M. Matsuura

32. Interpreting STM Image and Tunneling-Current-Induced Rotation of *cis*-2-Butene on a Pd(110) Surface..... 708
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-15 (Poster)
Sang Uck Lee and Young-Kyu-Han
33. First-Principle Analysis of Molecular Conduction: Lead-Molecule-Lead System Controlled by The Gate Electric Field..... 709
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-16 (Poster)
Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
34. First-Principles Studies on NiO Clusters..... 710
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-22 (Poster)
Y. P. Feng, G. W. Peng, R. Q. Wu, J. Ding and Y. Kawazoe
35. A Vacancy in Sodium Nano-Clusters..... 711
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-24 (Poster)
Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
36. First Principles Calculations of Surface and Bulk-Like Phonon Modes of Silicon Nano-Thin Film..... 712
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-25 (Poster)
Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe

37. Theoretical Study of Intermolecular Phonon Modes of a Disaccharide Hydrate Crystal of Lactose..... 713
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-26 (Poster)
 Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi, Ryunosuke Note, and Yoshiyuki Kawazoe
38. Role of Electron Correlation in The Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for Atoms..... 714
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-27 (Poster)
 Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
39. Theoretical Investigation of Polymerization Reaction of SiI₄ by Laser Ablation..... 715
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-28 (Poster)
 H. Kikuchi, M. Takahashi, Y. Kawazoe, A. Watanabe, A. Dmitruk and A. Kasuya
40. Theoretical Investigation of Stable Structures of Ge₆^Z (Z=0, 2-,4-,6-) Clusters..... 716
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-29 (Poster)
 Hideki Kikuchi, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
41. First-Principles Studies on Ga_mAs_n Clusters..... 717
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-30 (Poster)
 Y. P. Feng, T. B. Boon, H. H. Kwong, V. Kumar and Y. Kawazoe

42. Theoretical Study of Novel Quantum Dots for Application in Nanomedicine..... 718
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-31 (Poster)
Rodion Belosludov, Vijay Kumar, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya, Michael Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
43. About The Nature of Self-Preservation Effect..... 719
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-32 (Poster)
O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, T. Ikeshoji, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
44. Theoretical Design of Efficient Stilbazolium-Like Nonlinear Optical Cations Using Thiophene and Thiazole Substituents..... 720
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-33 (Poster)
Talgat Inerbaev, Shigeki Saito, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
45. Effect of Defect Structure on Electronic Properties in Tin-Doped Indium Oxide..... 721
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-34 (Poster)
T. M. Inerbaev, R. Sahara, K. Hirabayashi, H. Mizuseki, T. Nakamura and Y. Kawazoe

46. Theoretical Study on Elastic Properties of Perovskite-Type Borides. 722
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-35 (Poster)
Hidenobu Kojima, Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura,
Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and
Yoshiyuki Kawazoe
47. Structural and Bonding Stabilities of Mo-S Clusters at Sub-Nanometer
Size 723
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-36 (Poster)
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
48. Magnetic Circular Dichroism Spectra in a II-VI Diluted Magnetic
Semiconductor $Zn_{1-x}Cr_xTe$: First-Principles Calculations 724
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-37 (Poster)
Hongming Weng, Jinming Dong, T. Fukumura, M. Kawasaki and
Y. Kawazoe
49. Field Emission Spectroscopy as a New Tool for Considering The Electronic
Structure of Nanotubes 725
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-38 (Poster)
Mohammad Khazaei, Kenneth A. Dean, Amir A. Farajian and
Yoshiyuki Kawazoe
50. Understanding The Phase Stability and Magnetism in $CeMnNi_4$ Intermetallic
Compound 726
First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-39 (Poster)
M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe

51. Correct Interpretation of Hund's Multiplicity Rule for The Methylene Molecule..... 727
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-40 (Poster)
 Youhei Maruyama, Kenta Hongo, Masanori Tachikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
52. Effect of Atomic Vibrations in The Electronic Transport of a Carbon Nanotube..... 728
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-41 (Poster)
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
53. CO Oxidation Process on Pt-M (111) Alloys (M=Ru, Sn): An *ab initio* Study..... 729
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-42 (Poster)
 Toshiaki Oka, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
54. ZnO Nanotube Clusters..... 730
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-43 (Poster)
 Amit Jain, Vijay Kumar, Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe
55. Electronic Mechanism of The Role of Boron and Carbon in The Mechanical Properties in Perovskite-Type $RRh_3B_xC_{1-x}$ 731
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-48 (Poster)
 Ryoji Sahara, Hidenobu Kojima, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Sigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe

56. A First-Principles Study on The Magnetic Properties of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ and $\text{Nd}_{1.75}\text{Dy}_{0.25}\text{Fe}_{14}\text{B}$ 732
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-49 (Poster)
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
57. Effects of Tin and Oxygen on Electronic Structures of Tin-Doped Indium Oxide by Means of First Principles Calculations 733
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9) No.PS-50 (Poster)
 Koichi Hirabayashi, Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Takashi Nakamura and Yoshiyuki Kawazoe
58. Modeling of Radiative Heat Transfer in Crystal Growth of Oxide 734
 The 5th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (IWMCG-5)
 Bamberg, Germany (2006.9.10-13) pp.86-87
 T. Tsukada, M. Kobayashi and C.J. Jing
59. Nanosized Silver Iodide Beads as New Contrast Media for Sentinel Lymph Node Navigation Surgery 736
 The 25th Congress of the International Association for Breast Cancer Research
 Quebec, Canada (2006.9.15-18) pp.55-56 Poster No.SP30
 Sakurai Y., Takeda M., Kawazoe Y., Kasuya A., Kobayashi Y., Kamei T., Nakajima M. and Ohuchi N.
60. Fundamental Understanding of Materials Properties based on the Exact Solution of Many Body Coulombic System by Diffusion Quantum Monte Carlo Method 737
 The 20th International CODATA Conference
 Beijing, China (2006.10.22-25) pp.106-107
 Yoshiyuki Kawazoe

61. Structural, Electronic and Transport Properties of Doped Carbon Nanotube..... 738
 International Congress of Nanotechnology (ICNT 2006)
 San Francisco, USA (2006.10.30-11.2) (Oral)
 R. V. Belosludov, A. A. Farajian, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and Y. Kawazoe
62. CdSe-Based Particles with Novel Structural and Electronic Properties: Nanomedicine Application..... 739
 International Congress of Nanotechnology (ICNT 2006)
 San Francisco, USA (2006.10.30-11.2) (Poster)
 R. V. Belosludov, V. Kumar, H. Mizuseki, A. Kasuya, M. Philpott and Y. Kawazoe
63. Anisotropic Superconductors in Nano-Structures..... 740
 19th International Symposium on Superconductivity (ISS2006)
 Nagoya, Japan (2006.10.30-31) No.VP-13
 M. Kato, M. Hayashi, H. Ebisawa, T. Koyama, M. Machida and T. Ishida
64. Revival of Alchemy by *ab initio* Computer Simulation..... 741
 GRI Symposium I on Cluster Science: Breakthrough Advances in Cluster Science
 Nagoya, Japan (2006.11.7-9)
 Yoshiyuki Kawazoe
65. Infrared Photodissociation Spectroscopy of Metal Cluster Ions Adsorbed with Methanol..... 743
 GRI Symposium I on Cluster Science: Breakthrough Advances in Cluster Science
 Nagoya, Japan (2006.11.7-9)
 Shinichi Hirabayashi, Ryuji Okawa, Masahiko Ichihashi and Tamotsu Kondow

66. Non-equilibrium Green's Function Methods for Electron Transport: Code Development..... 744
 Accelrys User Meeting & Conference 2006
 Baltimore, USA (2006.11.13-15) (Oral)
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe
67. Evaluation of Interface Strength between Metal and Ceramics to be Utilized for Material Development in Innovative Nuclear Energy System..... 746
 The 2nd COE-INES International Symposium on Innovative Nuclear Energy Systems, INES-2
 Yokohama, Japan (2006.11.26-30) p.78 No.2C4#037
 Manabu Satou, Akira Hasegawa and Katsunori Abe
68. CdSe-core Quantum Dots with Novel Structural and Electronic Properties • 747
 2006 MRS Fall Meeting
 Boston, USA (2006.11.27-12.1) No.M1.2 (Oral)
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Kasuya, M. Philpott and Y. Kawazoe
69. Organic Doped Carbon Nanotube: Structural, Electronic and Transport Properties..... 748
 2006 MRS Fall Meeting
 Boston, USA (2006.11.27-12.1) No.Q10.46 (Oral)
 R. V. Belosludov, A. A. Farajian, S. U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu,
 Y. Iwasa and Y. Kawazoe
70. A First-Principles Study on Effects of Tin, Oxygen and Vacancy on Electronic Structures in Indium Oxide..... 749
 2006 MRS Fall Meeting
 Boston, USA (2006.11.27-12.1) No.QQ6.7 (Oral)
 R. Sahara, K. Hirabayashi, H. Mizuseki, T. Nakamura and Y. Kawazoe

71. Transport Properties through Organic Materials by Molecular Orbital Analysis..... 750
 2006 MRS Fall Meeting
 Boston, USA (2006.11.27-12.1) No.S9.45 (Oral)
 H. Mizuseki, R. V. Belosludov, A. A. Farajian, O.V. Pupysheva, C. Majumder, J. Wang, H. Chen and Y. Kawazoe
72. Transport Properties of Nanoscale Materials for Molecular Devices Application..... 751
 Proc. of International Symposium on Materials Chemistry (ISMC-06)
 Mumbai, India (2006.12.4-8) p.50
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
73. Exact Solutions of Many Body Coulombic Systems by Diffusion Quantum Monte Carlo Method Revealed Fundamental Misunderstanding of Hund's Multiplicity Rule and Molecular Stability..... 752
 The 2nd Tohoku-NUS Joint Symposium on the Future Nano-medicine and Bioengineering in the East Asian Region as the 8th International Symposium of Future Medical Engineering Based on Bio-nanotechnology Singapore
 Singapore (2006.12.4-5) pp.11-12
 Y. Kawazoe, K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyama and H. Yasuhara
74. Microscopic Theory of Nano-Scaled Anisotropic Superconductors..... 754
 2nd CREST Nano-Virtual-Labs Joint Workshop on Superconductivity (NVLS2006)
 Kyoto, Japan (2006.12.11-13) No.WED09 (Oral)
 Masaru Kato, Tomio Koyama, Masahiko Machida, Masahiko Hayashi, Hiromichi Ebisawa and Takekazu Ishida
75. First-principles Based Non-equilibrium Green's Function Approach Toward Single-Molecular Conductivity..... 756
 The 7th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2006)
 Kobe, Japan (2006.12.13-15) pp.80-81 (Oral)
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

76. Molecular Doping Effect on Electronic and Transport Properties of Carbon Nanotube..... 758
 The 7th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2006)
 Kobe, Japan (2006.12.13-15) pp.46-47 (Oral)
 R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and Y. Kawazoe
77. Size-Specific Reactivity of Metal Clusters..... 760
 International Workshop on Clusters -A Bridge across Disciplines
 Jekyll Island, Georgia, USA (2006.12.16-20)
 M. Ichihashi, T. Hanmura, S. Hirabayashi, R. Okawa and T. Kondow
78. Transport Properties of Nanoscale Materials for Molecular Wires Application..... 761
 International Congress on Nanoscience & Nanotechnology (ICNN2006)
 Tehran, Iran (2006.12.18-20) pp.9-10
 Hiroshi Mizuseki
- <2007 年>
1. Novel Quantum Dots for Early Cancer Diagnostic Applications..... 763
 The 9th International Symposium on Future Medical Engineering Based on Bio-nanotechnology (Tohoku University 21st Century COE Programme), jointly organized with The 19th Bioengineering Conference, 2006 Annual Meeting of BED/JSME
 Sendai, Japan (2007.1.7-9) pp.120-121
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Vijay Kumar, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe

2. Accurate Prediction of Adsorption Spectra of Promising Photosensitizers for PDF Application 765
 The 9th International Symposium on Future Medical Engineering Based on Bio-nanotechnology (Tohoku University 21st Century COE Programme), jointly organized with The 19th Bioengineering Conference, 2006 Annual Meeting of BED/JSME
 Sendai, Japan (2007.1.7-9) pp.122-124
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Ryan G. Hadt, Victor Nemykin and Yoshiyuki Kawazoe

3. Evaluation of Interface Strength between Metal and Ceramics to be Utilized for Development of Nuclear Energy Components 768
 Pusan-Tohoku "21COE" Joint Workshop on Mechanical Science based on Nanotechnology
 Pusan, Korea (2007.1.8) pp.54-55
 M. Satou, A. Hasegawa, S. Nogami and K. Abe

4. Switching and Negative Differential Resistance in a Gated Single-Molecule Transistor: Effects of Fixed and Shifting States 770
 APS March Meeting 2007
 Denver, Colorado, USA (2007.3.5-9)
 Amir Farajian, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Tomihiro Hashizume and Boris Yakobson

5. Transport Properties of Carbon Nanotubes: Doping Effect of Organic Molecules 771
 International Symposium on Theories of Organic / Metal Interfaces (ISTOMI'07)
 Osaka, Japan (2007.1.15-17) p.9, No.O9 (Oral)
 R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y.Iwasa and Y. Kawazoe

6. Electron Transport through an Aromatic and Antiaromatic Organic Molecules..... 772
 International Symposium on Theories of Organic / Metal Interfaces (ISTOMI'07)
 Osaka, Japan (2007.1.15-17) p.36, No.P6 (Poster)
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

7. Inelastic Transport of a Carbon Nanotube Junction..... 773
 International Symposium on Theories of Organic / Metal Interfaces (ISTOMI'07)
 Osaka, Japan (2007.1.15-17) p.39, No.P9 (Poster)
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

8. Two-Stage Rotation Mechanism for Group-V Precursor Dissociation on Si(001) 774
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Inv-1 (Invited talk)
 Jian-Tao Wang, C.F. Chen, E.G. Wang, Ding-Sheng Wang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

9. Structure Phase Transition in Amorphous Solid Ice under Pressure..... 775
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Inv-4 (Invited talk)
 V. R. Belosludov

10. Electronic and Magnetic Properties of Mn- and Cr-Doped GaN Low Dimensional Nanostructures..... 776
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Inv-7 (Invited talk)
 Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

11. Bonding and Magnetism in Transition Metal Sandwich Molecules..... 777
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Inv-10 (Invited talk)
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

12. Theoretical Investigation of the Role of Carbon in the Mechanical Properties in
Perovskite-Type Rare Earth Rhodium Borides..... 778
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Oral-4 (Oral)
Ryoji Sahara, Hidenobu Kojima, Toetsu Shishido, Akiko Nomura,
Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and
Yoshiyuki Kawazoe

13. Crystal Structure Analysis of Dicalcium Silicates..... 779
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-1 (Poster)
Ryoji Sakurada, Abhishek Kumar Singh, Masami Uzawa and
Yoshiyuki Kawazoe

14. Possibility of Hydrogen Adsorption on Rhodium Cubical Clusters..... 780
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-2 (Poster)
Young-Cho Bae, Vijay Kumar, Hiroki Osanai and Yoshiyuki Kawazoe

15. Electron Transport through an Aromatic and Antiaromatic Organic
Molecules..... 781
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-3 (Poster)
Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and
Yoshiyuki Kawazoe

16. Al_4Li_4 All-Metal Cluster: Does It have an Aromatic Duality? 782
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-4 (Poster)
Sang Uck Lee, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki
and Yoshiyuki Kawazoe
17. From Clusters to Assembly of Molybdenum Sulfide Nanotubes..... 783
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-5 (Poster)
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
18. First-Principles Calculations of the Far-Infrared Absorption Spectrum of
4'-Dimethylamino-N-Methyl-4-Stilbazolium Tosylate (DAST) 784
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-6 (Poster)
Shigeki Saito, Talgat M. Inerbaev, Hiroshi Mizuseki, Nobuaki Igarashi,
Ryunosuke Note and Yoshiyuki Kawazoe
19. Interstitial Oxygen and Electronic Properties of Bulk Tin-Doped Indium
Oxide..... 785
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-7 (Poster)
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
20. Transport Properties of Doped Single-Walled Carbon Nanotubes..... 786
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-8 (Poster)
R.V. Belosludov, S.U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and
Y. Kawazoe

21. Theoretical Investigation of Stable Structures of Ge₆ Clusters with Various Negative Charges 787
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-9 (Poster)
 Hideki Kikuchi, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
22. Influence of Boron Concentration on Elastic Properties of RRh₃B_X (R = Sc, Y, Ce, La) 788
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-10 (Poster)
 Hidenobu Kojima, Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
23. Theoretical Study on Elastic Properties of Boron-Rich Compounds 789
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-11 (Poster)
 Hidenobu Kojima, Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
24. A First-Principles Study on Electronic and Magnetic Properties in Y₂Fe₄₁₄B and Y₂Co₁₄B 790
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-12 (Poster)
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. *Ab-Initio* Study of the Spin-Dependent Transport, Phase Stability and Magnetism in CeMnNi₄ 791
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-13 (Poster)
 M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe

26. Correct Interpretation of Hund's Rule for Atoms Based on the Virial Theorem..... 792
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-14 (Poster)
Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
27. Analysis of Chemical Bonding in the Hydrogen Molecule..... 793
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-15 (Poster)
Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
28. Effect of Diameter on e-ph Coupling and Conductance of Metallic Carbon Nanotubes..... 794
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-18 (Poster)
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
29. CO Oxidation Process on Pt-M(111) Alloys (M=Ru, Sn): Theoretical Study..... 795
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-22 (Poster)
Toshiaki Oka, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
30. Oscillatory Convection in Czochralski Crystal Growth..... 796
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-23 (Poster)
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

31. Effect of Metal Element on Transport Properties through Porphyrin: Theoretical Approach..... 797
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-24 (Poster)
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
32. Interconnection of Carbon Nanotubes Using Peptide Linkages: New Types of Molecular Diodes..... 798
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-25 (Poster)
 Mohammad Khazaei, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe
33. Theoretical Study on the Mechanism of Dimerizations of Phosphaallenes..... 799
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-26 (Poster)
 Daisuke Hirose, Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe and Shigekazu Ito
34. Large Scale Computer Simulation Environment on Distributed Supercomputers Connected via Nanotechnology Research Network with ITBL System..... 800
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-27 (Poster)
 Yoshiyuki Kawazoe, Marcel Sluiter, Kyoko Ichinoseki, Ryoko Hayashi, Yasushi Inoguchi, Hitoshi Adachi, Hiroshi Yamaguchi and Chinatsu Kitagawa
35. Magic Numbers and Incipience of Bulk Features in Na, Cu, and Ag Clusters..... 801
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.PS-29 (Poster)
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar, Kenta Hongo, Tamio Ikeshoji and Yoshiyuki Kawazoe

36. Guest Atom Effects on the Electronic Structure of Semiconducting Type-I Clathrates..... 802
 Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28) No.Oral-6 (Oral)
 K. Akai, K. Koga, H. Takagi and M. Matsuura
37. Kinetics-Driven Growth Mechanism of Self-Organized Pentacene Thin Films..... 803
 APS March Meeting 2007
 Denver, Colorado, USA (2007.3.5-9) No.P42.00005
 A. Al-Mahboob, J. T. Sadowski, Y. Fujikawa, K. Nakajima, and T. Sakurai
38. Theoretical Prediction of New Nanoscale Materials Saving Energy..... 804
 International Symposium on Sustainable Development in East Asia
 Beijing, China (2007.3.8-9) Session 5. (Invited talk)
 Yoshiyuki Kawazoe
39. Transport Properties through Molecular Clusters by First-Principles Calculations..... 805
 The S3C – Symposium on Size Selected Clusters 2007
 Brand, Austria (2007.3.12-16) p.7
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Tomoki Uehara and Yoshiyuki Kawazoe
40. Bonding in Transition Metal Sandwich Molecules..... 806
 Symposium in Honor of William A. Lester Jr.'s 70th Birthday
 Berkeley, California, USA (2007.3.28-31)
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
41. Exact Solution of Quantum Many Body Coulombic System and Theoretical Prediction of New Materials for Nanotechnology..... 807
 The 45th Symposium on Basic Science of Ceramics and International Symposium on Interdisciplinary Science of Nanomaterials
 Sendai (2007.1.22-23) pp.32-33 (Invited talk)
 Yoshiyuki Kawazoe

42. Transport Properties through Nanoscale Materials by First Principle Calculations..... 809
The 45th Symposium on Basic Science of Ceramics and International Symposium on Interdisciplinary Science of Nanomaterials
Sendai (2007.1.22-23) pp.66-67 (Oral)
H. Mizuseki, T. Uehara, R. V. Belosludov, S. U. Lee, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
43. Electronic Mechanism of The Role of Vacancy and Carbon in The Mechanical Properties in Perovskite-type Rare Earth Rhodium Borides..... 811
The 45th Symposium on Basic Science of Ceramics and International Symposium on Interdisciplinary Science of Nanomaterials
Sendai (2007.1.22-23) pp.68-69
Ryoji Sahara, Hidenobu Kojima, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
44. Dopant Atoms Arrangement in Tin-Doped Indium Oxide..... 813
The 45th Symposium on Basic Science of Ceramics and International Symposium on Interdisciplinary Science of Nanomaterials
Sendai (2007.1.22-23) pp.70-71
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura

IV. 紀要

<2006 年>

1. CXFS による SAN 環境の構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 815
平成 17 年度 技術部活動報告 全国総合技術研究会
金属材料研究所技術部職員発表予稿 Vol.3 (2006.6) pp.73-76 No.2-6-2
全国総合技術研究会(愛知 2006.3.2-3 開催)より
五十嵐伸昭、古田正俊、川添良幸
2. 第一原理計算による希土類ロジウムホウ化物及び炭化物の硬度解析・・・ 819
平成 17 年度 東北大学金属材料研究所
金属ガラス総合研究センター共同利用研究報告書 (2006.6) pp.182-183
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. Diffusion Monte Carlo Study on the Interpretation of Hund's Multiplicity
Rule・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 821
Materials Design and Characterization Laboratory Supercomputer Center
Activity Report 2005 (2006.6) pp.76-77
Ryo Maezono, Takayuki Oyamada, Kenta Hongo and Yoshiyuki Kawazoe

<2007 年>

1. CXFS による SAN 環境の構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 823
東北大学金属材料研究所 技術部技術研究報告
第 22 号 (2007) pp.95-98
五十嵐伸昭、古田正俊、川添良幸
2. 金属材料研究所文献データベース KIND のリニューアル・・・・・・・・・・・・ 827
東北大学金属材料研究所 技術部技術研究報告
第 22 号 (2007) pp.123-130
本郷智子、長野 文、伊藤敏行、三浦重幸、川添良幸

3. 第一原理シミュレーション計算による新物質設計..... 835
21 世紀 COE プログラム 東北大学 物質創製・材料化国際研究教育拠点
2006 活動成果報告書 (2007.3) pp.54-56
川添良幸

4. Development of a General-Purpose Approach for Calculating Field Emission
from Nanostructures..... 838
21 世紀 COE プログラム 東北大学 物質創製・材料化国際研究教育拠点
2006 活動成果報告書 (2007.3) pp.111-113
Mohammad Khazaei

5. Na クラスターの融解挙動の異常性に関する理論研究..... 841
21 世紀 COE プログラム 東北大学 物質創製・材料化国際研究教育拠点
2006 活動成果報告書 (2007.3) p.132
伊藤正寛

6. 金属ガラスの形成のための電子規則..... 842
文部科学省 全国共同利用附置研究所連携事業 (金属ガラス・無機材料
接合技術開発拠点)
平成 18 年度連携プロジェクト 研究成果報告書 (2007.3.31) No. P-13
福原幹夫, 高橋まさえ, 川添良幸, 井上明久

V. 予稿集

<2006年>

1. 拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性とフント則成立理由の正しい理解 ～クーロン多体系の本質と超大規模計算～…………… 845
第2回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」
シンポジウム
「計算科学の戦略と次世代コンピュータ」
つくば、茨城 (2006.4.4-5) pp.138-149
川添良幸, 本郷研太, 小山田隆行, 前園 涼, 安原 洋
2. Electronic Mechanism of the Role of Vacancy and Carbon in the Elastic Properties in Perovskite-type Rare Earth Rhodium Borides…………… 857
Computational Science Workshop 2006 "Computational Materials Science: Frontier of applications of DFT and beyond"
Tsukuba, Japan (2006.4.17-19)
R. Sahara, H. Kojima, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar, K. Nakajima and Y. Kawazoe
3. Origin of Hund's Multiplicity Rule and Molecular Stability by DQMC…………… 858
The ICQC2006 Satellite Symposium in Sendai
Sendai, Matsushima, Japan (2006.5.16-19)
Y. Kawazoe, K. Hongo, T. Oyamada and H. Yasuhara
4. 厳密量子力学計算によるクーロン多体系の完全理解…………… 859
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.55 (基調講演)
川添良幸, 本郷研太, 小山田隆行, 安原 洋
5. Electronic and Transport Properties of Bi Atomic Wire…………… 860
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.107 No. PS1-19
R. V. Belosludov, A. Farajian, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

6. 強誘電性及び強弾性相転移を伴う酸化物ナノ粒子について…………… 861
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.134 No. PS1-46
恒川 信, 石川賢司, 八島正知, 川添良幸
7. 第一原理計算による $\text{ReRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$ ($\text{Re}=\text{Sc}, \text{Y}$) の機械的特性評価…………… 862
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.150 No. PS1-62
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
8. 第一原理計算を用いたペロブスカイト型希土類ロジウムホウ化物 RERh_3B_x
($\text{RE}=\text{Sc}, \text{Y}, \text{La}, \text{Ce}$) の弾性特性評価…………… 863
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.151 No. PS1-63
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 Pt-M ($\text{M} = \text{Ru}, \text{Sn}$) 合金上での CO 酸化に関する
理論研究…………… 864
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.189 No. PS1-101
岡 利昭, 水関博志, 川添良幸
10. 第一原理計算によるフェロセンワイヤーの電気伝導性評価…………… 865
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.190 No. PS1-102
上原朋樹, 五十嵐伸昭, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
水関博志, 川添良幸
11. Theoretical Study of Solvent Effect on Nonlinear Optical Properties of
N-Methyl and *N*-Aryl Pyridinium Cations…………… 866
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.191 No. PS1-103
Talgat Inerbaev, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki,
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

12. Na, Cu, Ag ナノクラスターの原子構造のサイズ依存性…………… 867
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.204 No. PS2-6
伊藤正寛, Vijay Kumar, 川添良幸
13. アニオン性 Si₆ 異性体の理論計算…………… 868
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.205 No. PS2-7
高橋まさえ, 川添良幸
14. 非経験的分子軌道法による Ge₆^z(z=0, 2-, 4-, 6-)クラスターの安定構造の研究…………… 869
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.206 No. PS2-8
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸
15. 酸化インジウムの電子状態に対するすず、酸素および空孔の影響…………… 870
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.257 No. PS2-59
平林亨一, 佐原亮二, 水関博志, 中村 崇, 川添良幸
16. 4d 遷移金属の非稠密構造とサイズ依存性…………… 871
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.260 No. PS2-62
袿 栄造, 長内弘喜, Vijay Kumar, 川添良幸
17. Different Field Emission Patterns Induced by Different Confinements of the Pentagon Rings Located on Capped Carbon Nanotubes' Tips…………… 872
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.269 No. PS2-71
Mohammad Khazaei, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
18. Electron-Phonon Coupling in Transport through Carbon Nanotubes…………… 873
ナノ学会第4回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.270 No. PS2-72
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

19. IV 族ベースクラスレートの電子構造と熱電特性…………… 874
ナノ学会第 4 回大会講演予稿集
京都大学 (2006.5.19-21) p.141 No. PS1-53
赤井光治, 古賀健治, 松浦 満
20. 第一原理計算による $\text{ReRh}_3\text{B}_x\text{C}_{1-x}$ ($\text{Re}=\text{Sc}, \text{Y}, \text{La}$) の機械的特性…………… 875
第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.52
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
21. 非経験的分子軌道法による Ge_6^Z ($z=0, 2-, 4-, 6-$) クラスターの安定構造の
研究…………… 876
第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.53
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸
22. Pt-M($\text{M}=\text{Ru}, \text{Sn}$) 合金上での CO 酸化に関する理論研究…………… 877
第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.54
岡 利昭, 水関博志, 川添良幸
23. 第一原理計算によるフェロセンワイヤーの電気的特性の理論解析…………… 878
第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.55
上原朋樹, 五十嵐伸昭, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian,
水関博志, 川添良幸
24. Na, Cu, Ag ナノクラスターの原子配列と形状のサイズ依存性…………… 879
第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.56
伊藤正寛, Vijay Kumar, 川添良幸

25. Theoretical Study of Solvent Effect on Nonlinear Optical Properties of Substituted Stilbazolium Cations..... 880
 第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.57
 Talgat Inerbaev, Shigeki Saito, Hiroshi Mizuseki, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
26. 第一原理計算を用いた $RERh_3B_X$ (RE=Sc, Y, La, Ce) の機械的特性評価..... 881
 第 111 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2006.5.25-26) p.58
 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
27. Similarity and Differences in the Growth Behaviors of Na, Cu and Ag Clusters..... 882
 Symposium on Progress and Prospects in Molecular Dynamics Simulation – In Memory of Professor Shuichi Nose
 慶応義塾大学, 神奈川 (2006.6.6-8)
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
28. 物質の安定性と磁性の根源理解からナノテクノロジーへの応用まで..... 883
 第 76 回 金研夏期講習会テキスト
 東北大学金属材料研究所 (2006.7.26-28) pp.33-55
 川添良幸
29. 分子安定性の根源的理解とナノ医療..... 907
 第 2 回 REDEEM シンポジウム 医療工学の最前線 – 血管の力学
 応答、ナノ医療、手術支援ロボット、血流シミュレーション –
 東京 (2006.8.12) pp.7-10
 川添良幸
30. Te 充填クラスレート $Te_8P_{16}Ge_{30}$ の P 原子配置と電子構造..... 911
 第3回日本熱電学会学術講演会論文集
 湘南工科大学 (2006.8.22-8.23) pp.102-103
 赤井光治, 岸本堅剛, 小柳 剛, 松浦 満

31. *Ab initio* Study about the Melting of Na Clusters..... 913
 KINKEN-WAKATE 2006
 3rd Materials Science School for Young Scientists
 "Physics and Applications of Advanced Magnetic Materials"
 Akiu, Sendai (2006.8.26-28) p.95
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar, Tamio Ikeshoji and Yoshiyuki Kawazoe
32. Different Field Emission Patterns Induced by Different Confinements of the
 Pentagon Rings Located on Capped Carbon Nanotubes' Tips..... 914
 KINKEN-WAKATE 2006
 3rd Materials Science School for Young Scientists
 "Physics and Applications of Advanced Magnetic Materials"
 Akiu, Sendai (2006.8.26-28) p.101
 Mohammad Khazaei, Kenneth A. Dean, Amir A. Farajian
 and Yoshiyuki Kawazoe
33. Superexchange Interactions in Impurity Pair Doped TiO₂..... 915
 KINKEN-WAKATE 2006
 3rd Materials Science School for Young Scientists
 "Physics and Applications of Advanced Magnetic Materials"
 Akiu, Sendai (2006.8.26-28) p.112
 P. Murugan, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Nishimatsu, T. Fukumura,
 M. Kawasaki and Y. Kawazoe
34. Magnetic Circular Dichroism Spectra in a II-VI Diluted Magnetic
 Semiconductor Zn_{1-x}Cr_xTe: First-Principles Calculations..... 916
 KINKEN-WAKATE 2006
 3rd Materials Science School for Young Scientists
 "Physics and Applications of Advanced Magnetic Materials"
 Akiu, Sendai (2006.8.26-28) p.129
 Hongming Weng, Jinming Dong, T. Fukumura, M. Kawasaki and
 Y. Kawazoe
35. 有機単結晶を用いた両極性発光トランジスタ..... 917
 第 67 回応用物理学会学術講演会講演予稿集
 立命館大学 (2006.8.29-9.1) p.1236 No.1p-ZH-4
 高橋哲生, 竹延大志, 竹谷純一, 岩佐義宏

36. 融液内対流の三次元非定常性を考慮した酸化物単結晶育成用 CZ 炉の
総合熱解析法の開発・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 918
第 67 回応用物理学会学術講演会講演予稿集
立命館大学 (2006.8.29-9.1) p.274 No.29p-ZF-12
敬 成君, 塚田隆夫, 水戸光将, 横山千昭, 小林正樹
37. Fe-Mn-Si-Cr 形状記憶合金における NV 析出物の役割・・・・・・・・ 919
日本金属学会 2006 秋期講演大会
新潟大学五十嵐キャンパス (2006.9.16-18) p.284 No.431
久保 紘, Susan Farjami, 佐原亮二, 川添良幸
38. 第一原理計算による酸化インジウムの電子状態に対するすず、酸素および
空孔の影響・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 920
日本金属学会 2006 秋期講演大会
新潟大学五十嵐キャンパス (2006.9.16-18) p.445 No.914
平林亨一, 佐原亮二, 水関博志, 中村 崇, 川添良幸
39. 第一原理計算を用いた RRh_3B_x ($R = Sc, Y, La, Ce$) の機械的特性評価と
そのホウ素濃度依存性・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 920
日本金属学会 2006 秋期講演大会
新潟大学五十嵐キャンパス (2006.9.16-18) p.445 No.915
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
40. 希土類ロジウムホウ化物および炭化物の機械的特性の第一原理計算・・ 920
日本金属学会 2006 秋期講演大会
新潟大学五十嵐キャンパス (2006.9.16-18) p.446 No.918
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
41. 金属クラスターイオン上に吸着したメタノールの赤外光解離分光・・・・・・・・ 921
分子構造総合討論会 2006
静岡 (2006.9.20-23) No.2B18
平林慎一, 大川隆司, 市橋正彦, 近藤 保

42. 異方的ナノ超伝導体の超伝導構造・・・・・・・・・・・・・・・・ 923
日本物理学会 2006 年度秋季大会
千葉大学 (2006.9.23-26) p.500 No.25pZG-2
加藤 勝, 小山富男, 町田昌彦, 石田武和
43. ナノ超伝導板における渦糸状態の準粒子構造・・・・・・・・ 924
日本物理学会 2006 年度秋季大会
千葉大学 (2006.9.23-26) p.535 No.24aXJ-11
末松久孝, 加藤 勝, 町田昌彦, 小山富男, 石田武和
44. 両極性有機単結晶トランジスタの発光特性・・・・・・・・ 925
日本物理学会 2006 年度秋季大会
千葉大学 (2006.9.23-26) p.705 No.26aYF-2
高橋哲生, 竹延大志, 竹谷純一, 岩佐義宏
45. レーザーアブレーションによる SiI₄ の重合反応の理論的解析・・・・・・・・ 926
日本物理学会 2006 年度秋季大会
千葉大学 (2006.9.23-26) No.24aWD-6(口頭発表)
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, DMITRUK. Andriy,
粕谷厚生
46. 第二、第三周期原子系列のフント則解釈における電子相関の役割・・・・ 927
日本物理学会 2006 年度秋季大会
千葉大学 (2006.9.23-26) No.24aXD-8(口頭発表)
小山田隆行, 本郷研太, 川添良幸, 安原洋
47. 多体電子系の完全解と第一原理 MD 計算によるナノテクノロジー用新物質
設計－電子相関に関する従来のモデルの間違いと厳密数値計算による
根本的理解－・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 928
富士通株式会社 材料設計ソリューションセミナー
愛知 (2006.9.26)
川添良幸

48. レーザーアブレーションによる SiI_4 の重合反応の理論的解析…………… 949
日本コンピュータ化学会 2006 秋季年会 (SCCJ2006)
北海道教育大学函館校 (2006.10.14-15) No.2P-06
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, DMITRUK. Andriy,
粕谷厚生
49. 事前曲げを加えた Nb_3Sn 複合超電導線材の歪解析…………… 950
平成 18 年度 電気・情報関連学会中国支部連合大会
岡山理科大学 (2006.10.21) p.431
岡田一星, 村瀬 暁, 金 錫範, 七戸 希, 淡路 智, 小黒英俊,
西島 元, 渡辺和雄
50. 三次元非定常融液対流を考慮した酸化物単結晶育成 CZ 炉の
総合熱解析…………… 951
第 36 回結晶成長国内会議
大阪大学 (2006.11.1-11.3) No.01aC04
敬 成君, 塚田隆夫, 水戸光将, 横山千昭, 小林正樹
51. 第一原理シミュレーション計算による分子及び分子性結晶の
テラヘルツ振動…………… 952
平成 18 年度日本分光学会テラヘルツ分光部会シンポジウム
"テラヘルツ分光の最先端"(招待講演)
湘南 (2006.11.2-3) No.I-6
川添良幸, 斎藤繁喜, Talgat. M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov,
水関博志, 五十嵐伸昭, 野手竜之介
52. Nb_3Sn 複合超電導線における事前曲げ効果の歪解析…………… 958
第 75 回 2006 年度秋季低温工学・超電導学会
熊本大学 (2006.11.20-22) p.266 No.3C-a06
岡田一星, 村瀬 暁, 金 錫範, 七戸 希, 淡路 智, 小黒英俊,
西島 元, 渡辺和雄, 和気正芳
53. 分子の安定性と磁性の根源的理解—多体電子系の厳密計算による
従来モデルの誤りの確定—…………… 959
第 20 回分子シミュレーション討論会講演要旨集 2006 (招待講演)
仙台 (2006.11.27-29) pp.16-17
川添良幸, 本郷研太, 小山田隆行, 丸山洋平, 安原 洋

54. First-Principles based Non-Equilibrium Green's Function Approach Toward Single-Molecular Conductivity..... 961
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.31
Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
55. アニオン性マグネシウムクラスターの構造と安定性に関する理論計算
—マグネシウム合金における電荷の偏りと合金生成メカニズム—..... 962
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.79
高橋まさえ, 川添良幸, 福原幹夫, 井上明久
56. レーザーアブレーションによる SiI_4 の重合反応の理論的解析..... 963
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.80
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, DMITRUK Andriy,
粕谷厚生
57. シリル化ホスファアルケンのホモカップリング反応に関する理論的研究・・ 964
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.81
平林亨一, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和
58. Theoretical Investigation of the Magnetic Properties in $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ with $\text{R} = \text{Y}$,
 Nd and Dy 965
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.86
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
59. Interstitial Oxygen and Dopant Arrangement in Tin-Doped Indium Oxide• 966
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.87
T.M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, T. Nakamura and Y. Kawazoe

60. ホスファアレンの二量化反応機構の理論的研究…………… 967
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.88
廣瀬大輔, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和
61. 第一原理計算を用いたハイパーボライド(NaAlB_{14} , AlMgB_{14} , AlLiB_{14})の
弾性特性評価…………… 968
第 112 回東北大学金属材料研究所講演会 (2006 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2006.11.30-12.1) p.89
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
62. ハイパーボライド(NaAlB_{14} , AlMgB_{14} , AlLiB_{14})の理論的弾性特性評価… 969
第 1 回日本フラックス成長研究発表会 講演要旨集
信州大学 (2006.12.1) p.20 No.1010A
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
63. 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における機械的特性
の理論解析…………… 970
第 1 回日本フラックス成長研究発表会 講演要旨集
信州大学 (2006.12.1) p.46 No.1P15
佐原亮二, 小島秀伸, 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

<2007 年>

1. ホスファアレンの二重化反応機構の理論的研究…………… 971
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
HPCS2007 論文集
つくば (2007.1.17-18) p.49 No.P1-1
廣瀬大輔, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和

2. シリル化ホスファアルケンのホモカップリング反応に関する理論的研究・・・ 972
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
HPCS2007 論文集
つくば (2007.1.17-18) p.50 No.P1-2
平林亨一, 伊藤繁和, 高橋まさえ, 川添良幸

3. Defect Structure and Electronic Properties of Tin-Doped Indium Oxide・・・ 973
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
HPCS2007 論文集
つくば (2007.1.17-18) p.51 No.P1-3
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura

4. 第一原理計算によるハイアーボライド弾性、構造特性・・・・・・・・・・・・ 974
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
HPCS2007 論文集
つくば (2007.1.17-18) p.53 No.P1-5
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

5. レーザーアブレーションによる SiI_4 の重合反応の理論的解析・・・・・・・・・・・・ 975
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
HPCS2007 論文集
つくば (2007.1.17-18) p.54 No.P1-6
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, Dmitruk Andriy,
粕谷厚生

6. 拡散量子モンテカルロ法による分子の安定性の厳密計算・・・・・・・・・・・・ 976
文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発
利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフト
ウェアの研究開発, 第1回公開シンポジウム
岡崎 (2007.3.5-6) pp.38-41
川添良幸

7. 次世代ナノ情報機能材料 ②次世代ナノ電子材料..... 980
文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発
利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフト
ウェアの研究開発, 第1回公開シンポジウム
岡崎 (2007.3.5-6) pp.48-51
前川禎通
8. ナノスピントロニクス理論の構築..... 984
文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発
利用」プロジェクト 次世代ナノ統合シミュレーションソフト
ウェアの研究開発, 第1回公開シンポジウム
岡崎 (2007.3.5-6) pp.74-78
前川禎通
9. d-dot を用いた論理回路のシミュレーション..... 989
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学 (2007.3.18-21) No.18aRC-1
中島 督, 加藤 勝, 小山富男, 町田昌彦, 石田武和, F. Nori
10. 空孔をもつ微細超伝導プレートの磁束の運動 II..... 990
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学 (2007.3.18-21) No.18aRD-2
佐藤 修, 加藤 勝
11. 有限超伝導ネットワークにおける磁束の運動..... 991
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学 (2007.3.18-21) No.18aRD-8
加藤 勝, 佐藤 修, 中道滋朗
12. ビリアル定理に基づく水素分子の化学結合の研究..... 992
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学 (2007.3.18-21) No.19pWB-5
本郷研太, 川添良幸, 安原 洋

13. Fundamental Progress in Computational Materials Science Achieved by Accurate *Ab Initio* Method – Hund's Multiplicity Rule – 993
21st COE PROGRAM, Tohoku Univ. Materials Research Center,
International Center of Research and Education for Materials,
Research & Education Review Meeting
東北大学金属材料研究所 (2007.3.19) p.18
Y. Kawazoe, K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyana and H. Yasuhara

14. Interconnecting Different Carbon Nanotubes by Using Peptide Linkages·· 994
21st COE PROGRAM, Tohoku Univ. Materials Research Center,
International Center of Research and Education for Materials,
Research & Education Review Meeting
東北大学金属材料研究所 (2007.3.19) p.27 (Poster)
Mohammad Khazaei, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe

15. Similarities and Differences in Na, Cu, and Ag Clusters······ 995
21st COE PROGRAM, Tohoku Univ. Materials Research Center,
International Center of Research and Education for Materials,
Research & Education Review Meeting
東北大学金属材料研究所 (2007.3.19) p.40 (Poster)
Masahiro Itoh, Vijay Kumar, Kenta Hongo, Tamio Ikeshoji
and Yoshiyuki Kawazoe

16. 3次元非定常融液対流を考慮した酸化物単結晶CZ炉の総合熱解析··· 996
化学工学会第72年会
京都大学 (2007.3.19-20) No.G301
敬成君, 猪原俊介, 杉岡健一, 塚田隆夫, 小林正樹

17. ホスファアレン二量化反応機構の理論的研究······ 997
日本化学会第87春季年会(2007)
関西大学 (2007.3.25-28) No.2 E4-43 (Oral)
廣瀬大輔, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和

18. シリル化ホスファアルケンのホモカップリング反応に関する理論的研究·· 998
日本化学会第87春季年会(2007)
関西大学 (2007.3.25-28) No.3 E4-11 (Oral)
平林亨一, 高橋まさえ, 伊藤繁和, 川添良幸

19. アニオン性マグネシウムクラスターの構造、安定性とマグネシウム基合金生成メカニズムに関する理論計算..... 999
日本化学会第 87 春季年会(2007)
関西大学 (2007.3.25-28) No.3 G3-35 (Oral)
高橋まさえ, 川添良幸, 福原幹夫, 井上明久
20. Interstitial Oxygen and the Electronic Properties of Tin-Doped Indium Oxide..... 1000
日本金属学会講演概要 2007 年春期 (第 140 回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.103 (S2.13)
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
21. Boron-rich compounds の理論的弾性特性評価..... 1001
日本金属学会講演概要 2007 年春期 (第 140 回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.106 (S2.19)
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
22. アニオン性マグネシウムクラスターの構造と安定性に関する理論計算・・ 1002
日本金属学会講演概要 2007 年春期 (第 140 回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.106 (S2.20)
高橋まさえ, 川添良幸, 福原幹夫, 井上明久
23. レーザーアブレーションによる SiI₄ の重合反応の理論的解析..... 1003
日本金属学会講演概要 2007 年春期 (第 140 回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.107 (S2.22)
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, DMITRUK Andriy,
粕谷厚生
24. 多電子系の精密計算による物質安定性の正しい理解..... 1004
日本金属学会講演概要 2007 年春期 (第 140 回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.98 (S2.3) (基調講演)
川添良幸, 本郷研太, 小山田隆行, 丸山洋平, 安原 洋

25. 第一原理計算による $R_2Fe_{14}B$ ($R=Y, Nd, Dy$)の磁気特性..... 1005
日本金属学会講演概要 2007年春期 (第140回) 大会
千葉工業大学 (2007.3.27-29) pp.98 (S2.4)
佐原亮二, 水関博志, 川添良幸

VI. 新聞記事

<2006 年>

1. 『東北大からスパコン受注 日立 毎秒 7.5 テラフロップス』…………… 1007
日刊工業新聞 (2006.12.12)
2. 『研究室最前線—スパコンに無限の可能性』…………… 1008
東北大学生新聞 (2006.12.20)
計算材料学研究部門 川添良幸

<2007 年>

1. 『熱視線の先に 東北の中国人留学生—原点は研究者の友情』…………… 1010
河北新報 (2007.3.13)

VII. 雑誌等掲載解説記事

<2005 年>

1. 『ナノ学会参加報告』…………… 1013
ナノテクノロジー総合支援プロジェクトセンターメールマガジン
Japan Nanonet Bulletin 第 89 号 (2005.5.25)

<2006 年>

1. 『第 17 回分子科学研究所技術研究会が開催されました』…………… 1016
技術部ニュース 第 47 号 (2006.3.28) p.187 諸報より
2. 『スパコンを活用した第一原理計算によるナノスケール構造体設計』…… 1017
SEMI News Vol.22 No.3 (2006.5-6) pp.20-21
川添良幸、水関博志
3. 『施設だより』…………… 1019
IMR ニュース KINKEN 2006 SUMMER VOL.50 (2006.6) p.8
川添良幸

4. 『Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America』…………… 1020
Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America
表紙図 (2006)
5. 『思い出写真館』…………… 1021
リラク (2006.8) pp.68-69
川添良幸
6. 『東北大、新機能物質創製に向け、未開拓だったナノクラスターの原子空孔を
第一原理計算で解析』…………… 1023
日経ナノビジネス (2006.9.19)
7. 『Preface of Series by the Editor-in-Chief』…………… 1025
Advances in Materials Research vol. 7
-Characterization of Corrosion Products on Steel Surfaces- (2006) Springer
Yoshiyuki Kawazoe
8. 『CdSe の分子的ナノ粒子』…………… 1026
IMR ニュース KINKEN 2006 AUTUMN VOL.51
新・研究インデックス (2006.10)
粕谷厚生
9. 『東北大、籠状クラスターなどの生成過程解明に向け、SiI₄クラスター形成過程
の理論計算に成功』…………… 1027
日経ナノビジネス (2006.10.19)
10. 『東北大金研の川添研究室、従来の理論を覆す電子軌道の新理論を
第一原理計算で証明。新物質創生に活用』…………… 1030
日経ナノビジネス (2006.11.17)
11. 『日経ナノビジネス 週刊メルマガ 月も太陽の惑星の1つ』…………… 1034
日経ナノビジネス 週刊メルマガ No.59 "編集部から" (2006.11.20)
12. 『Simulation and Design of Half-metallic Ferromagnets』…………… 1035
金属ガラス総合研究センターニュース Vol.4 (2006.11.22) p.4
Prof. Gour Prasad Das

13. 『新任のご挨拶』…………… 1036
 金属ガラス総合研究センターニュース Vol.4 (2006.11.22) p.6
 高橋まさえ
14. 『分子・固体の安定性はどのように実現されるか？－多電子論における
 ビリアル定理の重要性－』…………… 1037
 ナノ学会会報 第5巻 第1号 (2006) pp.3-7
 川添良幸、本郷研太、小山田隆行、丸山洋平、安原 洋
15. Preface - Proceeding of The Second Conference of The Asian Consortium for
 Computational Materials Science…………… 1042
 Comput. Mater. Sci., 36 (2006) pp.xi-xii
 Vijay Kumar, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov and
 Yoshiyuki Kawazoe
16. Special Issue on Advances in Computational Materials Science and Engineering
 IV-Preface…………… 1044
 Mater. Trans., 47[11] (2006) p.2611
 Yoshiyuki Kawazoe and Masanori Kohyama
17. Preface…………… 1045
 First Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of
 ACCMS (Asian Consortium for Computational Materials Science)
 Sendai, Japan (2006.9.7-9)
 Yoshiyuki Kawazoe
- <2007年>
1. 『平成18年度研究支援職員海外研修報告』…………… 1046
 技術部ニュース 第49号 (2007.1.31) pp.3-4 見聞録より
 五十嵐伸昭
2. Special Issue on ACCMS Working Group Meeting on Clusters and
 Nanomaterials – Preface –…………… 1048
 Mater. Trans., 48 [4] (2007) p.637
 Jun-ichi Murakami, Yoshiyuki Kawazoe, G. P. Das, Hiroshi Mizuseki,
 and Ryoji Sahara

3. Preface..... 1049
Foundation General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2007.2.26-28)
Yoshiyuki Kawazoe

VIII. 書籍

1. 『Electron Transport in Nanostructured Systems - *Ab Initio* Study』..... 1051
Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology 10 (2006),
Chapter 3, pp.211-238
Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Mizuseki, Rodion Belosludov and Amir Farajian

IX. 表彰・授与

1. 『RMCAS CONCRETE AWARD 2006』
31st CONFERENCE ON OUR WORLD IN CONCRETE & STRUCTURES
Singapore (2006.8.16-17)

X. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員・・・・・・・・ 1079
2. 計算材料学センター長 前川教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧・ 1080
3. 計算材料学センター責任部門 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会
一覧・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1086
4. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・ 1086
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・ 1087