

2007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

(2007年4月～2008年3月)

目 次

『巻頭言』・・・・・・・・・・・・・・・・・・計算材料学センター長 前川禎通

・ 3代目スパコン導入から一年・・・・・・・・・・・・・・・・・・川添良幸

I. 研究内容概要

1. シミュレーション研究による透明電極向けインジウム使用量低減技術開発…………… 1
東北大学金属材料研究所 T. M. Inerbaev, 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 蟹江澄志, 村松淳司, 中村 崇

2. レーザー蒸発法によるテトラヨウ化シランの重合…………… 3
東北大学金属材料研究所 高橋まさえ, 菊地英樹, 川添良幸
東北大学学際科学国際高等研究センター 粕谷厚生, Dmytruk Andriy
東北大学多元物質科学研究所 渡辺 明

3. feram コードによる BaTiO₃ 強誘電体薄膜キャパシタのヒステリシス・ループの分子動力学計算…………… 8
東北大学金属材料研究所 西松 毅, 川添良幸

4.	ホウ化物の弾性特性に関する理論研究.....	9
	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	
5.	An Atomistic Level Description and Design of Nanomaterials by <i>Ab initio</i> Calculations.....	14
	IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India V. Kumar Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University A. Katsuya University of Minnesota Duluth, USA V. Nemykin, R. G. Hadt	
6.	Transport Properties of Doped SWNT.....	17
	IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and Y. Kawazoe	
7.	Accurate Description of the Physical and Chemical Properties of Hydrogen Hydrates: Possible Application as Energy Storage.....	19
	Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia V. R. Belosludov, O.S. Subbotin IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	
8.	Controlled Release of Cisplatin Using Cyclodextrin	21
	IMR, Tohoku University A. Suvitha, R. V. Belosludov, M. Takahashi and Y. Kawazoe	
9.	Computational Study of Oligomeric Hematoporphyrin “Photosensitizer”.....	24
	IMR, Tohoku University A. Suvitha, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	
10.	Electronic and Optical Properties of the Al ₂ O ₃ Doped SiO ₂	27
	IMR, Tohoku University Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe	

11. Electron Transport Properties of CNT-Zn_x-CNT (x=10,20,30) 1D Heterojunctions
from First-Principles Calculations 29
IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Sang Uck Lee and
Yoshiyuki Kawazoe
G-COE Laboratory, Dep. of Applied Chemistry, Graduate School of
Engineering, Tohoku University Fabio Pichierri

12. Magnetic Phase Stability and Spin-Dependent Transport in CeNi₄M (M = Sc, Ti, V,
Cr, Mn, Fe, and Co) : A First-Principles Study 30
IMR, Tohoku University M. S. Bahramy, P. Murugan and Y. Kawazoe

13. First Principles Calculation Study on Catalytic Reaction for Fuel Cells 32
Development and Technology Division, Hitachi Maxell, Ltd.
Susumu Imai, Norio Ota
IMR, Tohoku University P. Murugan, Yoshiyuki Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar

14. Electron Transport of Carbon Nanotubes at Finite Temperature 34
IMR, Tohoku University Narjes Gorjizadeh, Yoshiyuki Kawazoe
Dep. of Mechanical and Materials Engineering, Wright State University,
Dayton, USA Amir A. Farajian

15. The Role of Aromaticity and the π -Conjugated Framework in Multiporphyrinic
Systems as Single-Molecule Switches 35
IMR, Tohoku University Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

16. Designing Nanogadget by Capped Carbon Nanotubes for Nanoelectronic Device:
Control of Electron Transport Characteristic through Nitrogen Doping 36
IMR, Tohoku University Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

17. Electron Transport through Carbon Nanotube Intramolecular Heterojunction with Peptide Linkage 37
IMR, Tohoku University Sang Uck Lee, Mohammad Khazaei,
Yoshiyuki Kawazoe
G-COE Laboratory, Dep. of Applied Chemistry, Graduate School of
Engineering, Tohoku University Fabio Pichierri
18. ビリアル定理を遵守する高精度第一原理計算によるフント第一, 第二則の解
釈および電子相関の研究 38
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
19. ホスファアレン二量化反応機構の理論的研究 42
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
20. Hydrogenated Fullerenes of Silicon, Germanium, and Tin 43
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
21. Sandwich Molecules Comprising of Transition Metal Layer between Large
Aromatic Hydrocarbons 45
University of California, Berkeley, USA Michael R Philpott
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
22. ナノマイクロ制御物質科学：新規な構造と機能の創成 47
横浜国立大学工学部 大野かおる, 石井 聡, 田中正俊, 武田 淳
東北大学金属材料研究所 川添良幸, 水関博志, 佐原亮二
23. Effects of Strain on the Dissociation Energetics and Kinetics of Sb₄ on Ge(001) 48
Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China
Jian-Tao Wang, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang
Dep. of Physics, University of Nevada, Las Vegas, Nevada, USA C. F. Chen
IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe

24. Stabilization of Planar Tetracoordinate Silicon: A New Building Block for Conjugated Si -Containing Systems 50
 Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary
 D. Szieberth
 IMR, Tohoku University M. Takahashi and Y. Kawazoe
25. Thermocapillary Convection of Liquid Bridge in Magnetic Field 53
 Dep. of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing, China
 Z. Zeng, Z. B. Chen
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
26. Design of Janus Nanoparticles for Multifunctionalities 57
 Dep. of Advanced Materials and Nanotechnology, Peking University, China
 Qiang Sun
 Dep. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qian Wang, Puru Jena
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
27. First-Principles Study of Magnetic Properties in TM-Doped ZnO 58
 Dep. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
28. Gate-Induced Switching and Negative Differential Resistance in a Single-Molecule Transistor: Emergence of Fixed and Shifting States with Molecular Length 63
 Dep. of Mechanical Eng. and Mater. Sci., Rice Univ., Houston, Texas, U.S.A.
 A. A. Farajian, B. I. Yakobson
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe
 Advanced Res. Lab, Hitachi Ltd., Hatoyama, Saitama, Japan T. Hashizume
29. A Density-Functional Study on the Adsorption of Aromatic Amino Acids on Graphene and SWCNT. 65
 Bhabha Atomic Research Centre, Mumbai, INDIA
 Chiranjib Majumder, C. Rajesh
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe

30. <i>Ab Initio</i> Calculation of Ga _m As _n and NiO Clusters.....	73
National University of Singapore Yuan Ping Feng, Jun Ding IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
31. Non-Cage Structures of Au ₁₆ Cluster.....	74
Dep. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA Gang Chen, Qiang Sun, Qian Wang, Puru Jena IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	
32. First-Principles Study of Length Dependence of Conductance in Alkanedithiols.....	79
Dep. of Physics, Fudan University, Shanghai, China Y. X. Zhou, F. Jiang, H. Chen IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe	
33. First Principle Study of Domain Matching Epitaxy Growth of AlN (0001) on Si(111) heterointerface.....	81
Hanoi university of Technology, Institute of Engineering Physics, Dep. of Theoretical Physics, Hanoi, Vietnam Vu Ngoc Tuoc	
34. 第一原理分子動力学法によりビーライト(C ₂ S)の結晶構造解析.....	86
秋田工業高等専門学校 桜田良治 Rice University, Houston, Texas, U.S.A. Abhishek Kumar Singh 太平洋セメント株式会社 鷗沢正美 東北大学金属材料研究所 川添良幸	
35. 金属クラスターと分子との反応.....	88
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	
36. 並列アルゴリズムによるナノクラスター最安定構造の探索.....	91
弘前大学理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	

37. 凝縮系中のナノ構造微細制御による機能発現…………… 92
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
宇部工業高等専門学校 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
38. 高圧力下における結晶構造予測…………… 94
独立行政法人理化学研究所・中央研究所 飯高敏晃
筑波大学大学院・数理物質科学研究科 重田育照
東北大学金属材料研究所 川添良幸
39. 第一原理計算による籠状シルセスキオキサン(POSS)の熱的安定性の研究…………… 97
株式会社積水インテグレートドリサーチ 阿部 弘
東北大学金属材料研究所 野手竜之介, 高橋まさえ, 川添良幸
40. グラフェンアトムの凝集ならびに陽電子寿命の理論的予測…………… 99
金沢大学大学院自然科学研究科 斎藤峯雄
東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. 炭素系物質におけるノンコリニア磁性…………… 100
金沢大学大学院自然科学研究科 石井史之
東北大学金属材料研究所 川添良幸
42. Terahertz Birefringence of β -BaB₂O₄ Crystal for Parametric Device…………… 101
Osaka Univ. Shigeki Saito, Elmer Estacio, Tomoharu Nakazato,
Yusuke Furukawa, Nobuhiko Sarukura
The Grad. Univ. for Adv. Studies Marilou Cadatal, Minh Hong Pham,
Carlito Ponseca Jr.
IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
43. 遷移金属クラスターの非稠密構造と水素吸着…………… 103
株式会社コーデック 裊 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

44. O(N)大規模第一原理計算によるグラフェン表面上における白金族クラスターの研究..... 105
 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
45. 非対称超伝導ネットワークにおける渦糸の運動のラチェット効果..... 107
 大阪府立大学大学院工学研究科数理工学 加藤 勝
 大阪府立工業高等専門学校 佐藤 修
46. ナノサイズの d-波超伝導体の数値シミュレーション..... 110
 大阪府立大学大学院工学研究科数理工学分野 末松久孝
 大阪府立大学大学院工学研究科数理工学分野 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分野 石田武和
47. 超伝導ネットワークの磁束状態..... 112
 大阪府立工業高等専門学校 佐藤 修
48. Si および Ge 単結晶二次曲面変形挙動の有限要素解析 114
 東北大学金属材料研究所 森下浩平, 中嶋一雄
49. 太陽電池用シリコンバルク多結晶の融液成長過程における多結晶組織とせん断ひずみとの関係 115
 東北大学金属材料研究所 高橋 勲, 宇佐美德隆, 沓掛健太郎,
 森下浩平, 藤原航三, 中嶋一雄
50. Pd₄₀Ni₄₀P₂₀ 金属ガラスの原子構造 116
 東北大学金属材料研究所 藤田武志, 陳 明偉
 Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
 宮城工業高等専門学校 今野一弥, 松浦 真
51. 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 118
 岡山大学自然科学研究科 村瀬 暁, 延原正彦, 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研究機構 和気正芳

52. GaN/サファイヤ系ヘテロ構造における残留熱応力解析…………… 123
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
53. 自己組織化単分子膜による有機電界効果トランジスタの閾値制御…………… 126
東北大学金属材料研究所 下谷秀和, 竹延大志, 岩佐義宏
セイコーエプソン株式会社 西川尚男
54. 融液内三次元非定常熱対流を考慮した CZ 炉総合熱解析 …………… 127
大阪府立大学大学院工学研究科 塚田隆夫
独立行政法人物質・材料研究機構光材料センター 島村清史
東北大学金属材料研究所 宍戸統悦
55. 第一原理計算による有機分子修飾セリアナノ粒子の研究 …………… 130
東北大学多元物質科学研究所 伊藤正寛
東北大学金属材料研究所 川添良幸

II. 原著論文

<2007 年>

1. *Ab initio* Study of Structural Stability of Mo-S Clusters and Size Specific Stoichiometries of Magic Clusters..... 131
J. Phys. Chem. A, **111** (2007) pp.2778-2782
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
2. Field Emission Signature of Pentagons at Carbon Nanotube Caps 136
J. Phys. Chem. C, **111** (2007) pp.6690-6693
Mohammad Khazaei, Kenneth A. Dean, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
3. Hydrogenated Caged Clusters of Si, Ge, and Sn and Their Endohedral Doping with Atoms: *Ab initio* Calculations..... 140
Phys. Rev. B, **75** (2007) pp.15542501-15542511
Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
4. Monte Carlo Calculation of Second and Third Virial Coefficients of Small-Scale Comb Polymers on Lattice 151
J. Chem. Phys., **126** (2007) pp.1549011-1549017
Kazuhito Shida, Atsuo Kasuya, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Yo Nakamura
5. Excess Polarizabilities Upon Excitation from the Ground State to the First Dipole-Allowed Excited State of Diphenylpolyenes..... 158
Int. J. Quantum Chem., **107**[10] (2007) pp.2006-2014
J. F. Ye, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
6. Quantum Length Dependence of Conductance in Oligomers: First-Principles Calculations..... 167
Phys. Rev. B, **75**[24] (2007) pp.2454071-2454076
Y. X. Zhou, F. Jiang, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

7. Electrical Properties and Colossal Electroresistance of Heteroepitaxial SrRuO₃/SrTi_{1-x}Nb_xO₃ (0.0002 G x G 0.02) Schottky junctions 173
 Phys. Rev. B, **75**[16] (2007) pp.1651011-1651017
 T. Fujii, M. Kawasaki, A. Sawa, Y. Kawazoe, H. Akoh and Y. Tokura

8. Theoretical Investigation of Stable Structures of Ge₆ Clusters with Various Negative Charges..... 180
 J. Jpn. Inst. Metals., **71**[6] (2007) pp.534-538 (in Japanese)
 Hideki Kikuchi, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

9. *Ab-Initio* Study of Hyperfine Structure of M₇ (M=Li, Na, K, Cu and Ag) Clusters, Using All-Electron Mixed-Basis Method..... 185
 Mater. Trans., **48**[7] (2007) pp.1883-1885
 Mohammad Saeed Bahramy and Yoshiyuki Kawazoe

10. CO Oxidation Process on Pt-M(111) Alloys (M = Ru, Sn): An *ab initio* Study 188
 Mater. Trans., **48**[7] (2007) pp.1907-1912
 Toshiaki Oka, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

11. Photodissociation Spectroscopy of the Chromium Trimer Ion..... 194
 Eur. Phys. J. D, **43** (2007) pp.23-26
 T. Majima, K. Tono, A. Terasaki, Y. Kawazoe and T. Kondow

12. Formation and Atomic Structure of Boron Nitride Nanotubes with a Cup-Stacked Structure 198
 Solid State Commun., **143** (2007) pp. 331-336
 Takeo Oku, Naruhiro Koi, Katsuaki Suganuma, Rodion V. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

13. Computational Design of a Rectifying Diode Made by Interconnecting Carbon Nanotubes with Peptide Linkages..... 204
 J. Phys. Chem. C, **111** (2007) pp.12175-12180
 Mohammad Khazaei, Sang Uck Lee, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe

14. Pseudopotential Hyperfine Calculations Through Perturbative Core-Level Polarization..... 210
 Phys. Rev. B, **76** (2007) pp.0351241-0351249
 Mohammad Saeed Bahramy, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

15. Assembling Nanowires from Mo-S Clusters and Effects of Iodine Doping on Electronic Structure 219
 Nano Lett., **7**[8] (2007) pp.2214-2219
 P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota

16. Quantum-Chemical Design of Covalent Linkages for Interconnecting Carbon Nanotubes..... 225
 Mater. Trans., **48**[8] (2007) pp.2148-2151
 Fabio Pichierri, Mohammad Khazaei and Yoshiyuki Kawazoe

17. High Temperature Ferromagnetism in Fe-Doped ZnO: a Density Functional Investigation..... 229
 Mater. Trans., **48**[8] (2007) pp.2119-2122
 D. Karmakar, I. Dasgupta, G. P. Das and Yoshiyuki Kawazoe

18. Modeling the Self-Preservation Effect in Gas Hydrate/Ice Systems 233
 Mater. Trans., **48**[8] (2007) pp.2114-2118
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, T. Ikeshoji, E. N. Brodskaya,
 E. M. Piotrovskaya, V. Sizov, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe

19. Detection of OH Stretching Mode of CH₃OH Chemisorbed on Ni₃⁺ and Ni₄⁺ by Infrared Photodissociation Spectroscopy..... 238
 J. Phys. Chem. A, **111**[31] (2007) pp.7664-7669
 Shinichi Hirabayashi, Ryuji Okawa, Masahiko Ichihashi, Tamotsu Kondow
 and Yoshiyuki Kawazoe

20. Gate-induced Switching and Negative Differential Resistance in a Single-molecule Transistor: Emergence of Fixed and Shifting States with Molecular Length 244
 J. Chem. Phys., **127** (2007) pp.0249011-0249015
 A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, T. Hashizume and
 B. I. Yakobson

21. Ferroelectric Phase Transitions in Ultrathin Films of BaTiO₃..... 249
 Phys. Rev. Lett., **99** (2007) pp.0776011-0776014
 Jaita Paul, Takeshi Nishimatsu, Yoshiyuki Kawazoe and Umesh V. Waghmare
22. *Ab initio* Studies of Structural, Elastic, and Electronic Properties of RRh₃B_x (R=Sc, Y, La, and Ce)..... 253
 Appl. Phys. Lett., **91** (2007) pp.0819011-0819013
 Hidenobu Kojima, Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
23. First-Principles Study of Magnetic Properties in V-Doped ZnO..... 256
 Appl. Phys. Lett., **91** (2007) pp.0631161-0631163
 Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena, Zheng Hu, R. Note and Y. Kawazoe
24. First-Principles Study of the Structural, Electronic, and Elastic Properties of RRh₃B_xC_{1-x} (R=Sc and Y)..... 259
 Phys. Rev. B, **76** (2007) pp.0241051-0241059
 Ryoji Sahara, Toetsu Shishido, Akiko Nomura, Kunio Kudou, Shigeru Okada, Vijay Kumar, Kazuo Nakajima and Yoshiyuki Kawazoe
25. Entropic and Conformational Study of Isolated Double-Tethered Chains by Three-Dimensional Lattice Simulations 268
 Physica A, **382** (2007) pp.405-414
 Kazuhito Shida, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
26. *Ab initio* Study of Single-Molecule Rotation Switch Based on Nonequilibrium Green's Function Theory 278
 J. Chem. Phys., **127** (2007) pp.0841071-0841076
 Y. Y. Liang, F. Jiang, Y. X. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
27. Application of the Reactivity Index to Propose Intra and Intermolecular Reactivity in Metal Cluster Interaction over Oxide Surface..... 284
 Mater. Trans., **48**[8] (2007) pp.2152-2158
 Abhijit Chatterjee and Yoshiyuki Kawazoe

28. Chemical Bonding in Metal Sandwich Molecules M_nR_2 with R=Pyrene $C_{16}H_{10}$ and Tetracene $C_{18}H_{12}$ 291
 Chem. Phys., **337** (2007) pp.55-67
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
29. Control of Electron Transport by Manipulating the Conjugated Framework..... 304
 J. Phys. Chem. C, **111** (2007) pp.15397-15403
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
30. Proposed Design Principle of Fluoride-based Materials for Deep Ultraviolet Light Emitting Devices 311
 Opt. Mater., **30** (2007) pp.15-17
 Nobuhiko Sarukura, Hidetoshi Murakami, Elmer Estacio, Shingo Ono, Riadh El Ouenzerfi, Marilou Cadatal, Takeshi Nishimatsu, Noriaki Terakubo, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Akira Yoshikawa and Tsuguo Fukuda
31. Silicon Subiodide Clusters..... 314
 J. Nanosci. Nanotechnol., **7** (2007) pp.3788-3791
 Andriy Dmytruk, Yeon-Su Park, Atsuo Kasuya, Hideki Kikuchi, Masae Takahashi, Yoshiyuki Kawazoe and Akira Watanabe
32. Molten Metal Flux Growth and Study of Properties and Chemical State of a New Compound $PrRh_{4.8}B_2$ 318
 J. Flux Growth, **2**[2] (2007) pp.87-92
 Toetsu Shishido, Masaoki Oku, Shigeru Okada, Naoyuki Nogi, Tadaaki Amano, Junhua Ye, Takao Mori, Masahiko Tanaka, Kiyoshi Shimamura, Akira Yoshikawa, Ryoji Sahara, Kunio Yubuta, Vijay Kumar, Akiko Nomura, Takamasa Sugawara, Shin-ichiro Tozawa, Kazuo Obara, Naofumi Ohtsu, Koichi Hayashi, Kozo Fujiwara, Noritaka Usami, Shigemi Kohiki, Katsuya Teshima, Shuji Oishi, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima

33. Influence of Molecular Geometry, Exchange-Correlation Functional, and Solvent Effects in the Modeling of Vertical Excitation Energies in Phthalocyanines Using Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) and Polarized Continuum Model TDDFT Methods: Can Modern Computational Chemistry Methods Explain Experimental Controversies?..... 324
 J. Phys. Chem. A, **111**[50] (2007) pp.12901-12913
 Victor N. Nemykin, Ryan G. Hadt, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
34. Facile [3+2] Dimerization and Formal Dehydrogenative Coupling Mode of a Cyanophenylphosphaallene 337
 Tetrahedron **63**, (2007) pp.10246-10252
 Shigekazu Ito, Sou Hashino, Noboru Morita, Masaaki Yoshifuji, Daisuke Hirose, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
35. Bonding and Magnetism in Transition Metal Sandwich Structures with the Aromatic Hydrocarbon Coronene C₂₄H₁₂ Outer Layers..... 344
 Chem. Phys., **342** (2007) pp.223-235
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
36. Laser-Induced Polymerization of SiI₄..... 357
 Chem. Phys. Lett., **450** (2007) pp.1-5
 Masae Takahashi, Hideki Kikuchi, Yoshiyuki Kawazoe, Andriy Dmytruk, Atsuo Kasuya and Akira Watanabe
37. Size-dependent Magnetism and Spin-Glass Behavior of Amorphous NiO Bulk, Clusters, and Nanocrystals: Experiments and First-Principles Calculations 362
 Phys. Rev. B, **76** (2007) pp.2244021-2244025
 J. B. Yi, J. Ding, Y. P. Feng, G. W. Peng, G. M. Chow, Y. Kawazoe, B. H. Liu, J. H. Yin and S. Thongmee
38. A Global Analysis of Heat Transfer in the CZ Crystal Growth of Oxide: Recent Developments in the Model..... 367
 J. Cryst. Growth, **303** (2007) pp.150-155
 Takao Tsukada, Masaki Kobayashi and Chengjun Jing

39. Global Analysis of Heat Transfer Considering Three-Dimensional Unsteady Melt Flow in CZ Crystal Growth of Oxide 373
 J. Cryst. Growth, **307** (2007) pp.235-244
 C. J. Jing, S. Ihara, K.-I. Sugioka, T. Tsukada, M. Kobayashi, M. Mito and C. Yokoyama

40. Three-Directional FEM Analyses of Pre-Bending Effects for Nb₃Sn Composite Wires 383
 IEEE Trans. Appl. Supercond., **17**[2] (2007) pp.2676-2679
 Satoru Murase, I. Okada, K. Kiyama, N. Nanato, S. B. Kim, H. Oguro, G. Nishijima, S. Awaji, K. Watanabe and M. Wake

41. Composition Dependence of Structural and Electronic Properties of Ga_mAs_n Clusters from First Principles 387
 Phys. Rev. B, **76** (2007) pp.0453361-0453368
 Y. P. Feng, T. B. Boo, H. H. Kwong, C. K. Ong, V. Kumar and Y. Kawazoe

<2008年>

1. *Ab Initio* Interpretation of Hund's Rule for the Methylene Molecule: Variational Optimization of Its Molecular Geometries and Energy Component Analysis 395
 Int. J. Quantum Chem., **108**[4] (2008) pp.731-743
 Youhei Maruyama, Kenta Hongo, Masanori Tachikawa, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

2. First-Principles Study of Length Dependence of Conductance in Alkanedithiols 408
 J. Chem. Phys., **128**[4] (2008) pp.0447041-0447045
 Y. X. Zhou, F. Jiang, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

3. Fluorescence Spectra of Poly(di-*n*-hexylsilane)/TiO₂ Nanoparticle Hybrid Film 413
 Polymer, **49**[2] (2008) pp.554-560
 Akira Watanabe, Tokuji Miyashita, Atsuo Kasuya, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

4. Design of Janus Nanoparticles with Atomic Precision: Tungsten-Doped Gold Nanostructures..... 420
ACS NANO, **2**[2] (2008) pp.341-347
Qiang Sun, Qian Wang, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

5. A First-Principles Study of Phase Transitions in Ultrathin Films of BaTiO₃..... 427
PRAMANA-J. Phys., **70**[2] (2008) pp.263-270
J. Paul, T. Nishimatsu, Y. Kawazoe and U. V. Waghmare

6. Magnetic Phase Stability and Spin-Dependent Transport in CeNi₄M (M=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, and Co): First-Principles Study..... 435
Phys. Rev. B, **77** (2008) pp.0644011-0644016
P. Murugan, M. S. Bahramy and Y. Kawazoe

7. Chromium Aromatic Hydrocarbon Sandwich Molecules and the Eighteen-Electron Rule 441
J. Phys. Chem. A, **112** (2008) pp.2034-2042
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

8. Global Analysis of Heat Transfer in CZ Crystal Growth of Oxide Taking into Account Three-Dimensional Unsteady Melt Convection: Effect of Meniscus Shape 450
J. Cryst. Growth, **310** (2008) pp.204-213
C. J. Jing, S. Ihara, K.-I. Sugioka, T. Tsukada and M. Kobayashi

9. Birefringence of β -BaB₂O₄ Crystal in the Terahertz Region for Parametric Device Design 460
Appl. Phys. Lett., **92**[9] (2008) pp.0911161-0911163
Elmer Estacio, Shigeki Saito, Tomoharu Nakazato, Yusuke Furukawa, Nobuhiko Sarukura, Marilou Cadatal, Minh Hong Pham, Carlito Ponseca, Jr., Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

10. Kinetics-Driven Anisotropic Growth of Pentacene Thin Films..... 463
Phys. Rev. B, **77** (2008) pp.0354261-0354266
Abdullah Al-Mahboob, Jerzy T. Sadowski, Yasunori Fujikawa, Kazuo Nakajima, and Toshio Sakurai

11. Evolution of Magnetic Circular Dichroism of Pure ZnTe in Magnetic Field:
Spectral Similarity between Undoped and Cr-doped ZnTe..... 469
Phys. Rev. B, **77** (2008) pp.1252061-1252066
Hongming Weng, Jinming Dong, Tomoteru Fukumura, Masashi Kawasaki
and Yoshiyuki Kawazoe

III. 国際会議発表論文

<2006 年>

1. Preparation and Characterization of Perovskite-type RRh_3B (R = rare earth)..... 475
International Conferences on Modern Materials & Technologies 2006
(CIMTEC 2006)
Sicily, Italy (2006.6.4-9)
T. Shishido, S. Kohiki, S. Okada, A. Nomura, M. Oku, R. Sahara, K. Yubuta,
H. Kojima, T. Sugawara, K. Obara, V. Kumar, Y. Kawazoe and K. Nakajima
2. Magnetic Properties of RRh_3B (R = Rare Earth Element) 476
15th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements
2006 (SCTE 2006)
Cracow, Poland (2006.7.15-20)
T. Shishido, T. Mori, S. Okada, M. Oku, K. Kudou, K. Iizumi, A. Nomura,
T. Sugawara, R. Sahara, K. Yubuta, V. Kumar, K. Hayashi, K. Shimamura,
J. Ye, Y. Kawazoe and K. Nakajima

<2007 年>

1. Magnetic Properties of NiO Clusters 477
2007 MRS Spring Meeting
San Francisco (2007.4.9-13) Session J9, p.112
Y. Feng, G. Peng, R. Wu, J. Ding and Y. Kawazoe
2. Origin of Molecular Stability and Magnetism Revealed by the Complete Solution of
Many-electron Schroedinger Equation 478
2007 MRS Spring Meeting
San Francisco (2007.4.9-13) Session DD2, p.213
Y. Kawazoe, K. Hongo, T. Oyamada, Y. Maruyama and H. Yasuhara
3. Control of Electron Transport by Manipulating a Conjugated Framework 479
“Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport” in Conjunction
with Atomistix Workshop 2007
Tokyo, Japan (2007.6.7-8) p.57, No.P10
Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

4. Fundamental Understanding of Materials Properties Based on the Exact Solution of Many Body Coulombic System by Diffusion Quantum Monte Carlo Method 480
 International Conference on Materials for Advanced Technologies 2007
 (ICMAT 2007) Frontiers in Computational Materials Science
 Singapore (2007.7.1-6) OB-8-IN6
 Y. Kawazoe

5. Absolute Value Estimations for Hyperfine Structure Constants, Ionization Potentials, and Electron Affinities..... 481
 Challenges in Computer Simulations (CCS2007): Bridging the Time and Length Scales
 Singapore (2007.7.23-25) p.22
 Yoshiyuki Kawazoe

6. Model for Czochralski Crystal Growth..... 482
 2007 International Symposium on Computational Mechanics (ISCM2007)
 Beijing, China (2007.7.30-8.1)
 Zhong Zeng, Yongxiang Zhang and Jingqiu Chen

7. Global Analysis of Heat Transfer Considering Three Dimensional Unsteady Melt Flow in CZ Crystal Growth of Oxide 490
 15th International Conference on Crystal Growth
 Salt Lake City, USA (2007.8.13-17) No.411
 Chengjun Jing, Shunsuke Ihara, Ken-ichi Sugioka, Takao Tsukada and Masaki Kobayashi

8. Theoretical Description of Amorphous Solid Ice under Pressure..... 491
 International Symposium of the 15th Anniversary of the Academic Exchange Agreement between Tohoku University and Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (100th Anniversary of Tohoku University)
 Sendai, Japan (2007.8.24)
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin and Y. Kawazoe

9. *Ab initio* Study on Conductance Properties: A Case Study of Ferrocene Monomer and Dimer..... 497
 International Symposium of the 15th Anniversary of the Academic Exchange Agreement between Tohoku University and Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (100th Anniversary of Tohoku University)
 Sendai, Japan (2007.8.24)
 Hiroshi Mizuseki, Tomoki Uehara, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Nobuaki Igarashi and Yoshiyuki Kawazoe
10. *Ab initio* Molecular Orbital and Density Functional Theory Calculations on Various Clusters, Molecular Vibrations, and Chemical Reactions 507
 International Symposium of the 15th Anniversary of the Academic Exchange Agreement between Tohoku University and Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (100th Anniversary of Tohoku University)
 Sendai, Japan (2007.8.24)
 Masae Takahashi
11. Self-Limitation for Interstitial Oxygen Release from Tin-Doped Indium Oxide..... 515
 International Symposium of the 15th Anniversary of the Academic Exchange Agreement between Tohoku University and Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (100th Anniversary of Tohoku University)
 Sendai, Japan (2007.8.24)
 Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Takashi Nakamura
12. Crystal Structure Analysis of Dicalcium Silicates by *Ab-initio* Calculation..... 523
 32nd Conference on OUR WORLD in CONCRETE & STRUCTURES
 Singapore (2007.8.28-29) pp.407-412
 R. Sakurada, A. K. Singh, T. M. Briere, M. Uzawa and Y. Kawazoe
13. Flexural Performance of RC Beams Reinforced with Braided Organic FRP Bars..... 529
 32nd Conference on OUR WORLD in CONCRETE & STRUCTURES
 Singapore (2007.8.28-29) pp.413-418
 R. Sakurada, T. Shimomura, K. Maruyama and S. Matsubara

14. Quality Assurance for Computational Materials Science..... 535
 17th Iketani Conference: The Doyama Symposium on Advanced Materials
 Tokyo, Japan (2007.9.5-8) p.141
 Yoshiyuki Kawazoe, Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yohei Maruyama and
 Hiroshi Yasuhara
15. Paradigm Shift of the Materials Design by Computer Simulation and the Activity of
 Asian Consortium on Computational Materials Science Virtual Organization
 (ACCMS-VO) 536
 The 9th High Performance Computing International Conference & Exhibition
 (HPC Asia 2007)
 Seoul, Korea (2007.9.9-12) p.37
 Yoshiyuki Kawazoe
16. First-Principles Exploration of Ferroelectricity in Nano-Scale Thin Films and in
 Multiferroics..... 537
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.I4-3
 Jaita Paul, Nirat Ray, T. Nishimatsu, Y. Kawazoe and U. V. Waghmare
17. Transport Properties of Nanoscale Materials for Molecular Wires Application 538
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.I3-3
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Sang Uck Lee and Yoshiyuki Kawazoe
18. Accurate Description of the Physical and Chemical Properties of Hydrogen
 Hydrates: Possible Application as Energy Storage..... 539
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Korea, Seoul (2007.9.12-16) No.I6-1
 V. R. Belosludov

19. *Ab initio* Description of Quantum Dots/Organic Ligands Interface: Effect of Core Structure on Cyclotoxicity..... 540
The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.O3-5
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Kasuya, V. Kumar and Y. Kawazoe
20. Theoretical Study of the Structural, Mechanical and Electronic Properties in Borides 541
The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.O8-2
R. Sahara, H. Kojima, T. Shishido, A. Nomura, K. Kudou, S. Okada, Vijay Kumar, K. Nakajima and Y. Kawazoe
21. Two-Stage Rotation Mechanism for Group-V Precursor Dissociation on Si(001)..... 542
The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.O7-4
Jian-Tao Wang, C. F. Chen, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
22. Hyperfine Structure Calculations Through All-Electron Mixed-Basis Method..... 543
The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P1-02
M. S. Bahramy, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe
23. Electron Transport Properties of Free-base Porphyrin Molecular Systems: Effects of Isomer and Contact Structure 544
The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P2-02
Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

24. Application of Carbon Nanotube as a Nano-device: Zener and Esaki Diode..... 545
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P2-03
 Sang Uck Lee, Mohammad Khazaei, Rodion V. Belosludov, Fabio Pichierri,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
25. Electron Transport Properties of Carbon Nanotube-Zinc Metal Junctions..... 546
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P2-09
 M. Khazaei, S. U. Lee, F. Pichierri and Y. Kawazoe
26. Assembling of Mo-S Nanowires from Clusters and Effect of Iodine Doping 547
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P3-06
 P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
27. DFT Study on Magnesium-Based Clusters: The Role of Yttrium for the Formation
 of Mg-Cu-Y Alloy System..... 548
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P3-10
 Masae Takahashi, Mikio Fukuhara, Akihisa Inoue and Yoshiyuki Kawazoe
28. Density Functional Study of Structural Distortion in Yttrium Clusters..... 549
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P3-16
 N. S. Venkataramanan, P. Murugan, A. Suvitha and Y. Kawazoe

29. *Ab initio* Studies of the Behavior of Hydrogen Adsorption on Cubical Rhodium Clusters..... 550
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P3-18
 Y. C. Bae, V. Kumar, H. Osanai and Y. Kawazoe
30. Reducible and Nonreducible Defect Clusters in Tin-Doped Indium Oxide: Revision of Current Concept 551
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P4-09
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
31. Configuration Entropy as One of the Main Gel-Forming Factors for Inclusion Compounds..... 552
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P6-01
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, Y. Kawazoe and J. Kudoh
32. Possibility of Self-Preservation Effect in Hydrogen Hydrates 553
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P6-02
 O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, T. Ikeshoji, Y. Kawazoe and J. Kudoh
33. Development of Thermoelectric Material $Ba_8Al_xGa_yGe_{30-x-y}$ based on the First-principle Electronic Structure Calculation..... 554
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-4)
 Korea, Seoul (2007.9.12-16) No.P6-03
 T. Uemura, K. Akai, K. Kishimoto, K. Koga, H. Takagi, T. Koyanagi and M. Matsuura

34. First-principles Electronic Structure Study on Nano-cage Network Materials..... 555
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Korea, Seoul (2007.9.12-16) p.169, No.P6-10
 K. Akai, K. Kishimoto, K. Koga, H. Takagi, T. Koyanagi and M. Matsuura
35. DFT Studies of n-Alkyl Cyanobiphenyl Nematogens on Binding to Metal Wire 556
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P7-24
 A. Suvitha, P. Murugan, Hitoshi Nejo, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
36. Thermal Stabilities of Caged Silsesquioxane (POSS) by First-Principles
 Calculations..... 557
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P8-18
 H. Abe, R. Note, M. Takahashi and Y. Kawazoe
37. Temperature Dependence of Elastic Properties in FCC Metals with a Renormalized
 Potential..... 558
 The 4th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials
 Science (ACCMS-4)
 Seoul, Korea (2007.9.12-16) No.P8-21
 R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno and Y. Kawazoe
38. A Study on the Effect of Unsteady Three-Dimensional Melt Flow on CZ Oxide
 Crystal Growth Process Using a Global Analysis of Heat Transfer 559
 1st Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow
 (ASCHT2007)
 Xi'an, China (2007.10.18-21) Paper No.ASCHT2007-007
 C. J. Jing, S. Ihara, K.-I. Sugioka, T. Tsukada and M. Kobayashi

39. Control of Electron Transport in Molecular Device..... 564
 Joint Symposium on Materials Science and Engineering for the 21st Century
 Hsinchu, Taiwan (2007.10.21-24) p.33
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
40. Water Effect on Infrared Spectra of DNA: First-Principles Study 565
 6th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New
 Materials and Devices '07 (ALC'07)
 Kanazawa, Japan (2007.10.28-11.2) No.TuP-109
 Hisashi Taniguchi, Mineo Saito, Yasutaka Aoyama, Tetsunori Yamamoto and
 Hidemi Nagao
41. Aggregation of Graphene Adatoms: First-Principles Study 566
 6th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New
 Materials and Devices '07 (ALC'07)
 Kanazawa, Japan (2007.10.28-11.2) No.TuP-112
 Tomofumi Hashi, Mineo Saito and Kazuaki Yamashita
42. Bistability of Ultrathin Bi Films 567
 6th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New
 Materials and Devices '07 (ALC'07)
 Kanazawa, Japan (2007.10.28-11.2) No.TuP-113
 Mineo Saito, Yohei Takemori, Tomofumi Hashi and Tadaaki Nagao
43. Laser-Induced Polymerization of SiI₄ into One-, Two-, and Three-Dimensional
 Clusters..... 568
 The First Asian Silicon Symposium
 Zao, Miyagi, Japan (2007.11.1-3) No.P091
 Masae Takahashi, Hideki Kikuchi, Yoshiyuki Kawazoe, Andriy Dmytruk,
 Atsuo Kasuya and Akira Watanabe
44. Transport Properties of Atomic and Molecular Wires: First Principles Calculations 569
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.E13.4
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

45. Temperature Dependence of Elastic Properties of Transition Metals Using Face-Centered-Cubic Lattice Model with Renormalized Potentials 570
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.E17.29
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
46. Transport Properties through Organic Molecules by First Principles Calculations and Green's Function Approach 571
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.F3.14
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Sang Uck Lee, Amir A. Farajian, Olga V. Pupyshva, Chiranjib Majumder, Jian-Tao Wang, Hao Chen and Yoshiyuki Kawazoe
47. Transport through a Gated Single-molecule Transistor: Switching and Negative Differential Resistance 572
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.F9.41
 Amir Farajian, Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe, Tomihiro Hashizume and Boris Yakobson
48. Effect of Conductive State on the Defect Cluster Stability in Tin-Doped Indium Oxide 573
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.HH11.11
 Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Takashi Nakamura
49. Transport Properties of Doped Carbon Nanotubes: Effect of Organic Molecules Encapsulation 574
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.II7.4
 Rodion Belosludov, Sang Uck Lee, Hiroshi Mizuseki, Taishi Takenobu, Yoshihiro Iwasa and Yoshiyuki Kawazoe

50. An Atomistic Level Description of the Quantum Dot Organic Ligand Interface by
Ab initio Calculations: Effect of Core Structure on Cytotoxicity 576
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.PP4.4
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
51. Physical and Chemical Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate: Theoretical
 Aspects of Energy Storage Application 578
 2007 MRS Fall Meeting
 Boston, MA (2007.11.26-30) No.S7.8
 Rodion Belosludov, Oleg Subbotin, Hiroshi Mizuseki, Vladimir Belosludov
 and Yoshiyuki Kawazoe
52. Computational Design of a Nano-device by Manipulating the Carbon Nanotube..... 580
 Tohoku University / Korea University Joint Symposium
 on Advanced Materials 2007
 Seoul, Korea (2007.12.17-18) p.19, No.OB-02
 Sang Uck Lee, Mohammad Khazaei, Rodion V. Belosludov, Fabio Pichierri,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
- <2008 年>
1. Theory of Hydrogen Hydrates with Hexagonal Structure..... 581
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-3
 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
2. First Principle Study of Domain Matching Epitaxy Growth Semiconductor
 Hetero-Interface..... 582
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-13
 Vu Ngoc Tuoc

3. Planar Graphene Molecules with D_{6h} Symmetry: Zig-zag $C_{6m}H_{6m}$ ($m = 1, 2, \dots, 10$) and Crenellated $C_{6(3m-2-3m+1)}H_{6(2m-1)}$ ($m = 1, 2, \dots, 6$) 583
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-16
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

4. First-Principles Studies of Magnetic Properties of ZnO-based DMSs 584
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-20
 Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Y. Kawazoe

5. Effects of Strain on the Dissociation Energetics and Kinetics of Sb_4 on Ge(001) 585
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-21
 Jian-Tao Wang, C. F. Chen, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

6. Effect of Co and Al Substitution in $LiNiO_2$ Cathode Materials 586
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Inv-25
 P. Murugan, Vijay Kumar, Junichi Kawamura and Yoshiyuki Kawazoe

7. Fluoride-Based Materials for Deep Ultraviolet Light Emitting Devices 587
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Oral-1
 Nobuhiko Sarukura and Yoshiyuki Kawazoe

8. Crystal Structural Properties of Beta-Form Dicalcium Silicates based on *Ab-initio* Calculations 588
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Oral-7
Ryoji Sakurada, Abhishek Kumar Singh, Masami Uzawa and Yoshiyuki Kawazoe

9. Infrared Photodissociation of Molecule-Adsorbed Cobalt Clusters – Vibrational and Electronic Transitions 589
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Oral-14
Masahiko Ichihashi, Shinichi Hirabayashi and Tamotsu Kondow

10. Transport Properties of Semiconducting Group-IV Based Clathrates 590
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.Oral-15
T. Eto, T. Uemura, K. Kishimoto, K. Koga, K. Akai, H. Takagi, T. Koyanagi, S. Shimamura and M. Matsuura

11. Atomic Structures and Properties of Boron Nitride Nanotubes 591
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-8
Takeo Oku, Naruhiro Koi, Katsuaki Sukanuma, Rodion V. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

12. A New Molecular-Dynamics/Continuum Hybrid Method 592
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-12
Y. Senda and G. Kim

13. The Role of Aromaticity and the π -Conjugated Framework in Multiporphyrinic Systems as Single-Molecule Switches..... 593
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-13
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
14. Electron-Capture Decay Rate and its Temperature Dependency for $^7\text{Be}@C_{60}$ by First-Principles Calculation Based on Density Functional Theory..... 594
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-14
 T. Morisato, K. Ohno, T. Ohtsuki, M. Sluiter and Y. Kawazoe
15. A First Principles Study on Mechanical and Electronic Properties in Metal Hydrides..... 595
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-15
 Ryoji Sahara, Bun Tuchiya, Hiroshi Mizuseki, Shinji Nagata, Tatsuo Shikama and Yoshiyuki Kawazoe
16. Correct Interpretation of Hund's First and Second Rules for Atoms..... 596
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-16
 Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
17. Introduction of feram Code - Molecular Dynamics Simulator for Bulk and Thin-Film Ferroelectrics and Relaxors 597
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-17
 Takeshi Nishimatsu, Jaita Paul, Yoshiyuki Kawazoe and Umesh Waghmare

18. *Ab Initio* Studies of the Behavior of Hydrogen Adsorption on 8 Atom Cubical Clusters of Transition Metals..... 598
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-18
Y. C. Bae, V. Kumar, H. Osanai and Y. Kawazoe
19. Electronic and Optical Properties of In- and Al-doped GaN Nanowires..... 599
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-19
H. Takagi, K. Koga, K. Akai and M. Matsuura
20. Critical Phenomena of Site-Percolation Including Two Different Sizes of Particles..... 600
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-20
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Kanie, Kaoru Ohno, Atsushi Muramatsu and Yoshiyuki Kawazoe
21. TD-DFT Studies on Oligomers of Hematoporphyrin..... 601
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-21
A. Suvitha, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and M. Kohno
22. Role of Guest Size on CS-I or CS-II Hydrate Formation..... 602
The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-22
O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, R. V. Belosludov, P. M. Rodger, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

23. Theoretical Study of the “*Cap Exchange*” Strategy for Covering of CdSe-based Quantum Dots 603
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-23
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, V. Kumar, A. Kasuya and Y. Kawazoe
24. Defects and Electronic Band Structure of Bulk Tin Dioxide..... 604
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-24
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
25. Electronic and Optical Properties of the Al₂O₃ Doped SiO₂ 605
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-25
 Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe
26. Effect of Defects in Conductance of Graphene Nanoribbons..... 606
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-26
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
27. Theoretical Description of Structural Phase Transitions of Mixed Gas Hydrates 607
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-27
 T. P. Adamova, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

28. Theoretical Study of Magnetism, Phase Stability and Spin-Dependent Transport in CeMnNi_4 608
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-28
 M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe
29. Electron Transport Properties of CNT- Zn_x -CNT ($x= 10, 20, 30$) 1D Heterojunctions from First-Principles Calculations 609
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-29
 Mohammad Khazaei, Sang Uck Lee, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe
30. Metal Chalcogenide Nanowire Assemblies for Li-ion Batteries 610
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-30
 P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
31. A First-Principles Study on the Mechanism of Dimerization of Phosphaallenes 611
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-32
 D. Hirose, M. Takahashi, Y. Kawazoe and S. Ito
32. Electronic Structure of Oligothiophenes: Aromatic and Quinoid Structures 612
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-34
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

33. Structural Optimization by TOMBO: Case Study of Hydrides and Molecules 613
 The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28) No.PS-35
 Masaya Iwamoto, Osamu Kikegawa, Daisuke Hirose, Saeed Bahramy,
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
34. Transport Properties of One-Dimension Nanosystems for Application in Molecular
 Electronics 614
 2008 International Conference on Nanoscience and Nanotechnology
 (ICONN2008)
 Melbourne, Australia (2008.2.25-29)
 R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, A. A. Farajian, T. Takenobu,
 Y. Iwasa and Y. Kawazoe
35. Theoretical Study of Quantum Dots/Organic Ligands Interface: Effect of Core
 Structure on Cyclotoxicity 616
 2008 International Conference on Nanoscience and Nanotechnology
 (ICONN2008)
 Melbourne, Australia (2008.2.25-29)
 Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Vijay Kumar, Atsuo Kasuya and
 Yoshiyuki Kawazoe
36. Theoretical Study of the Structural, Mechanical, and Electronic Properties in
 Hydrides 618
 American Physical Society 2008 March Meeting
 New Orleans, U.S.A. (2008.3.10-14)
 Ryoji Sahara, Bun Tsuchiya, Hiroshi Mizuseki, Shinji Nagata, Tatsuo Shikama
 and Yoshiyuki Kawazoe
37. Critical Phenomena of Site-Percolation Models with Two Different Sizes of
 Particles on a Square Lattice 619
 American Physical Society 2008 March Meeting
 New Orleans, U.S.A. (2008.3.10-14)
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Kanie, Atsushi Muramatsu,
 and Yoshiyuki Kawazoe

IV. 紀要

<2007年>

1. 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 621
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」
プロジェクトー次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの
研究開発ー
平成 18 年度 研究成果報告書 pp.38-41
川添良幸
2. 次世代ナノ情報機能材料 ②次世代ナノ電子材料 625
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」
プロジェクトー次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの
研究開発ー
平成 18 年度 研究成果報告書 p.62
前川禎通
3. ナノスピントロニクス理論の構築 626
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」
プロジェクトー次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの
研究開発ー
平成 18 年度 研究成果報告書 pp.88-92
前川禎通
4. 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 631
平成 18 年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2007.6) pp.26-31
村瀬 暁, 岡田一星, 金 錫範, 七戸 希, 淡路 智, 小黒英俊,
西島 元, 渡辺和雄, 和気正芳
5. 第一原理計算によるナノテクノロジー研究 637
平成 18 年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2007.6) pp.93-97
大野かおる, 石井 聡, 川添良幸, 佐原亮二, 水関博志

6. 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…………… 642
平成 18 年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2007.6) pp.144-145
桜田良治, Tina Marie Briere, Abhishek Kumar Singh, 川添良幸
7. 新物質開発に向けた遷移金属クラスターの物性と反応性の解明…………… 644
平成 18 年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2007.6) pp.150-151
近藤 保, 寺寄 亨, 市橋正彦, 安松久登, 川添良幸
8. B-C-N 系ナノ物質の原子配列と物性に関する研究 …………… 646
平成 18 年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2007.6) p.172
奥 健夫, 小井成弘, 菅沼克昭, 川添良幸, Rodion V. Belosludov
9. 客員教授挨拶…………… 647
東北大学金属材料研究所 金属ガラス総合研究センター
平成 18 年度 研究成果報告書 (2007.7) pp.252-254
Gour Prasad Das

V. 予稿集

<2006年>

1. ペロブスカイト型希土類ロジウムボライドの磁性、硬度、耐酸化性…………… 651
第23回希土類討論会
東京 (2006.5.30-31) pp.18-19 No.1A-05
宍戸統悦, 葉 金花, 奥 正興, 岡田 繁, 工藤邦男, 飯泉清賢, 石沢芳夫,
田中雅彦, 佐原亮二, 湯蓋邦夫, 小島秀伸, ビジャイ 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

2. 熔融金属フラックス法による R-Rh-B (R = 希土類元素) 系化合物単結晶の
育成…………… 653
日本セラミックス協会第19回秋季シンポジウム
山梨大学 (2006.9.19-21) P.107 No.1PD02
宍戸統悦, 岡田 繁, 葉 金花, 工藤邦男, 飯泉清賢, 手嶋勝弥,
大石修治, 野村明子, 菅原孝昌, 小島秀伸, 佐原亮二, 湯蓋邦夫,
川添良幸, 中嶋一雄

3. 熔融金属フラックス法の適用による R-Rh-B (R = 希土類元素) 系化合物単
結晶の育成…………… 654
第1回日本フラックス成長研究発表会
信州大学 (2006.12.1) (ポスター発表) No.1P16
宍戸統悦, 岡田 繁, 葉 金花, 田中雅彦, 森 孝雄, 工藤邦男,
飯泉清賢, 澤田 豊, 手嶋勝弥, 大石修治, 野木直行, 野村明子,
菅原孝昌, 小島秀伸, 佐原亮二, 湯蓋邦夫, 林 好一, 奥 正興,
川添良幸, 中嶋一雄

4. ペロブスカイト型希土類ロジウムボライドのアーキ溶融合成、溶融金属フラックス成長、緒性質 656
- 第1回日本フラックス成長研究発表会
信州大学 (2006.12.1) (ポスター発表) No.1P17
宍戸統悦, 岡田 繁, 葉 金花, 田中雅彦, 森 孝雄, 島村清史,
工藤邦男, 飯泉清賢, 澤田 豊, 石沢芳夫, 手嶋勝弥, 大石修治,
野木直行, 古曳重美, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎, 小原和夫,
小島秀伸, 佐原亮二, 湯蓋邦夫, 吉川 彰, 林 好一, 奥 正興,
川添良幸, 中嶋一雄

<2007年>

1. R-Pd-B系ペロブスカイト型化合物の合成と性質 658
- 第24回希土類討論会
九州大学 (2007.5.17-18)
宍戸統悦, 奥 正興, 葉 金花, 岡田 繁, 工藤邦男, 飯泉清賢,
澤田 豊, 石沢芳夫, 田中雅彦, 佐原亮二, 小島秀伸,
ビジャイ クマール, 湯蓋邦夫, 野村明子, 菅原孝昌, 手嶋勝弥,
大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄
2. ロジウム立方クラスターへの水素吸着のサイズ依存性 660
- ナノ学会第5回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.91, No.PS3
裊 栄造, Vijay Kumar, 長内弘喜, 川添良幸
3. 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 661
- ナノ学会第5回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.103, No.PS15
高橋まさえ, 川添良幸, 福原幹夫, 井上明久
4. R-Rh-B系ペロブスカイト型化合物のホウ素不定比と硬さ 662
- ナノ学会第5回大会
つくば市 (2007.5.21-23) No.PS29
宍戸統悦, 奥 正興, 岡田 繁, 葉 金花, 森 孝雄, 工藤邦男,
飯泉清賢, 澤田 豊, 佐原亮二, 小島秀伸, ビジャイ クマール,
福原幹夫, 湯蓋邦夫, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎, 小原和夫,
野木直行, 古曳重美, 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄

5. $R_2Fe_{14}B$ ($R=Y, Nd, Dy$) の磁気特性の第一原理計算…………… 663
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.197, No.PS107
佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
6. レーザーアブレーションにより生成した Si_nI_m クラスターの安定構造に関する理論計算…………… 664
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.199, No.PS109
菊地英樹, 高橋まさえ, 川添良幸, 渡辺 明, Dmytruk Andriy, 粕谷厚生
7. ホスファアレンの head-to-tail 型[2+2]および[3+2]二量化反応の理論的研究…………… 665
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.202, No.PS112
廣瀬大輔, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和
8. Effect of Interstitial Oxygen Release on Defect Clusters Nonreducibility in Tin-Doped Indium Oxide…………… 666
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.203, No.PS113
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
9. ホスファエテニルラジカルのホモカップリング反応に関する理論的研究…………… 667
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.204, No.PS114
平林亨一, 高橋まさえ, 川添良幸, 伊藤繁和
10. 有機-無機転換で得られる酸化亜鉛ファイバーの微構造と性質…………… 668
ナノ学会第 5 回大会
つくば市 (2007.5.21-23) No.PS136
宍戸統悦, 松永敬浩, 小中 尚, 稲葉克彦, 湯蓋邦夫, 野村明子, 佐藤友章,
佐々木正明, 川添良幸, 中嶋一雄, 芳賀浩一

11. 第一原理計算を用いたボロンリッチボライドの弾性特性評価…………… 669
ナノ学会第5回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.235, No.PS145
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
12. 第一原理計算によるフェロセン分子およびワイヤーの電気伝導性評価…………… 670
ナノ学会第5回大会
つくば市 (2007.5.21-23) p.241, No.PS151
水関博志, Rodion V. Belosludov, 上原朋樹, 五十嵐伸昭, 川添良幸
13. CZ 酸化物単結晶成長時の固液界面形状に及ぼす3次元非定常融液内対流
の影響…………… 671
第44回日本伝熱シンポジウム
長崎市 (2007.5.22-25) No.D211
敬 成君, 猪原俊介, 杉岡健一, 塚田隆夫, 小林正樹
14. $R_2Fe_{14}B$ ($R = Y, Nd, Sm, Gd, Dy, Er$) の磁気特性の第一原理計算…………… 673
第113回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007年春季)
東北大学金属材料研究所 (2007.5.24-25) p.87
佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
15. Interstitial Oxygen and Dopant Arrangement in Tin-Doped Indium Oxide…………… 674
第113回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007年春季)
東北大学金属材料研究所 (2007.5.24-25) p.88
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, T. Nakamura and Y. Kawazoe
16. First Principle Studies on the $SiO_2-Nd_2O_3-Al_2O_3$ Glass…………… 675
第113回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007年春季)
東北大学金属材料研究所 (2007.5.24-25) p.89
Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe

17. From Clusters to Assembly of Molybdenum Sulfide Nanowires and Effects of Iodine Doping on Electronic Structure 676
 第 113 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.5.24-25) p.90
 P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
18. ペロブスカイト型 RM_3B ($R =$ 希土類元素、 $M = Pd, Rh$) の合成および評価 677
 第 5 回ホウ素・ホウ化物研究会
 東京理科大学 野田キャンパス (2007.7.7)
 宍戸統悦, 葉 金花, 佐々木孝彦, 岡田 繁, 工藤邦男, 飯泉清賢,
 澤田 豊, 石沢芳夫, 森 孝雄, 田中雅彦, 野木直行, 佐原亮二,
 ビジャイ クマール, 湯蓋邦夫, 野村明子, 菅原孝昌, 手嶋勝弥,
 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄
19. ホウ化物の機械的特性の理論解析 679
 第 5 回ホウ素・ホウ化物研究会
 東京理科大学 野田キャンパス (2007.7.7)
 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
20. 第一原理計算による $AlMB_{14}$ ($M=Li, Na, Mg$) の機械的特性 682
 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
 「次世代ナノ情報機能・材料」成果報告会
 東京大学理学部 (2007.7.13-14) P.28
 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
21. 物性理論計算の抜本的進展とナノテクノロジー用新物質設計の可能性 683
 第 77 回 金研夏期講習会テキスト
 東北大学金属材料研究所 (2007.7.25-27) pp.151-176
 川添良幸

22. GaN/sapphire 系ヘテロ構造における残留熱応力解析 708
第 68 回応用物理学会学術講演会 2007 年秋季
北海道工業大学 (2007.9.4-8) No.4p-ZR-13
後藤 裕輝, 李 錫雨, 李 賢宰, 李 孝鐘, 河 俊碩, 後藤 武生, 曹 明煥,
八百 隆文
23. 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 709
第 68 回応用物理学会学術講演会 2007 年秋季
北海道工業大学 (2007.9.4-8) p.1357, No.7a-D-10
T. M. Inerbaev, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸, 中村 崇
24. 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 709
第 68 回応用物理学会学術講演会 2007 年秋季
北海道工業大学 (2007.9.4-8) p.1357, No.7a-D-11
水関博志, Rodion V. Belosludov, 上原朋樹, 五十嵐伸昭, 川添良幸
25. 分子のフント則の解釈 710
第 1 回分子科学討論会
東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.1E01
丸山洋平, 本郷研太, 立川仁典, 川添良幸, 安原 洋
26. 第二、第三周期原子についてのフント第一、第二則の統一的解釈 712
第 1 回分子科学討論会
東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.1E02
小山田隆行, 本郷研太, 川添良幸, 安原 洋
27. Intrinsic Limit for Interstitial Oxygen Release from Tin-Doped Indium Oxide 714
第 1 回分子科学討論会
東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.1P008
Talgat M. Inerbaev, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki,
Yoshiyuki Kawazoe and Takashi Nakamura
28. ポテンシャル繰り込み理論による FCC 金属の弾性特性の温度依存性 717
第 1 回分子科学討論会
東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.1P009
佐原亮二, 水関博志, 大野かおる, 川添良幸

29. 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…………… 719
 第1回分子科学討論会
 東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.1P056
 水関博志, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, Sung Uck Lee, 上原朋樹,
 五十嵐伸昭, 川添良幸
30. ガラス合金生成モデルとしてのマグネシウムクラスターの理論計算…………… 721
 第1回分子科学討論会
 東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.2B14
 高橋まさえ, 福原幹夫, 川添良幸, 井上明久
31. 第一原理計算による籠状シルセスキオキサン(POSS)の熱的安定性の研究…………… 723
 第1回分子科学討論会
 東北大学 川内北キャンパス (2007.9.17-20) No.3P007
 阿部 弘, 野手竜之介, 高橋まさえ, 川添良幸
32. 第一原理計算による $AlMB_{14}$ ($M=Na, Li, Mg$) の機械的特性評価…………… 725
 日本金属学会 2007年秋期(第141回)大会
 岐阜大学 (2007.9.19-21) p.209, No.115
 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
33. Theoretical Study of (A, Sn)-Doped Indium Oxide ($A=Mg, Al, Ti, Mo$)…………… 726
 日本金属学会 2007年秋期(第141回)大会
 岐阜大学 (2007.9.19-21) p.211, No.122
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
34. CH_2 分子の等電子異核系列に関するフント則の解釈…………… 727
 日本物理学会第62回年次大会
 北海道大学 札幌キャンパス (2007.9.21-24) No.22aWA-2
 丸山洋平, 本郷研太, 立川仁典, 川添良幸, 安原 洋
35. フント第一、第二則の統一的解釈…………… 728
 日本物理学会第62回年次大会
 北海道大学 札幌キャンパス (2007.9.21-24) No.22aWA-5
 小山田隆行, 本郷研太, 川添良幸, 安原 洋

36. グラフェンにおけるアドアトムおよびダイマーの第一原理シミュレーション..... 729
 日本物理学会第 62 回年次大会
 北海道大学 札幌キャンパス (2007.9.21-24) No.22pPSB-31
 橋 知史, 斎藤峯雄, 山下和晃
37. マグネシウム基合金のモデルとしてのマグネシウムクラスターの構造と安定性の理論計算..... 730
 日本物理学会第 62 回年次大会
 北海道大学 札幌キャンパス (2007.9.21-24) No.23pXQ-8
 高橋まさえ, 川添良幸, 福原幹夫, 井上明久
38. DNA の赤外吸収スペクトルに対する第一原理計算..... 731
 日本物理学会第 62 回年次大会
 北海道大学 札幌キャンパス (2007.9.21-24) No.24aPS-131
 谷口 仁, 斎藤峯雄, 青山泰崇, 山本哲徳, 長尾秀実
39. ポテンシャル繰り込み理論による FCC 金属の弾性特性の温度依存性解析 732
 合金状態図第 172 委員会 第 14 回委員会・研究会
 愛知 (2007.11.16-17)
 佐原亮二, 水関博志, 大野かおる, 川添良幸
40. グラフェンアドアトムとその集合体の第一原理シミュレーション..... 734
 第 21 回分子シミュレーション討論会
 石川県金沢市 (2007.11.26-28) No.109P
 橋 知史, 斎藤峯雄
41. 第一原理計算によるグラフェンナノリボンの磁気相図 736
 第 21 回分子シミュレーション討論会
 石川県金沢市 (2007.11.26-28) No.110P
 澤田啓介, 石井史之, 斎藤峯雄, 岡田 晋, 河合孝純
42. DNA の赤外吸収スペクトルにおける水の効果 738
 第 21 回分子シミュレーション討論会
 石川県金沢市 (2007.11.26-28) No.124P
 谷口 仁, 斎藤峯雄, 青山泰崇, 山本哲徳, 長尾秀実

43. 大規模シミュレーション計算結果の 3 次元可視化ソフトウェア統一とプレゼンテーションシステムの構築..... 740
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.6
 佐藤和弘, 一関京子, 三浦重幸, 野手竜之介, 五十嵐伸昭, 川添良幸,
 古田正俊, 桐山智文, 北川千夏, 衛藤奈緒美
44. Evaluation of Platinum Complexes for pH Sensitive Anticancer Drugs by Computational Simulation..... 741
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.13
 A. Suvitha, R. V. Belosludov, M. Takahashi and Y. Kawazoe
45. Theoretical Study of Magnetism, Phase Stability and Spin-Dependent Transport in CeMnNi_4 742
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.14
 M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe
46. Effect of Conductive State on the Defect Cluster Stability in Tin-Doped Indium Oxide..... 743
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.15
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
47. Control of Electron Transport in Molecular Device..... 744
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.16
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

48. 第一原理計算による籠状シルセスキオキサン(POSS)の熱的安定性の研究…………… 745
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.19
阿部 弘, 野手竜之介, 高橋まさえ, 川添良幸
49. レーザーアブレーションによる SiI_4 の重合反応 …………… 746
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.37
高橋まさえ, 菊地英樹, 川添良幸, Dmytruk Andriy, 粕谷厚生, 渡辺 明
50. Stabilization of Planar Tetracoordinate Silicon: a New Building Block for
Conjugated Si-Containing Systems …………… 747
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.38
D. Szieberth, M. Takahashi and Y. Kawazoe
51. Li Intercalated Assemblies of Mo_6S_6 Nanowires and Effects of Iodine Doping…………… 748
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.43
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
52. Virial 定理に基づくフント第一、第二則の統一的解釈 …………… 749
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.47
小山田隆行, 本郷研太, 川添良幸, 安原 洋
53. Transport Properties of Interconnected Carbon Nanotubes by Zinc Atoms …………… 750
第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.52
Mohammad Khazaei, Sang Uck Lee, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe

54. 新スーパーコンピューティングシステムの概要 751
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.54
 五十嵐伸昭, 一関京子, 野手竜之介, 三浦重幸, 佐藤和弘,
 松本秀一, 山口 裕, 石川真二, 宮崎北斗, 三森悟毅, 武尾 寛,
 古田正俊, 永島裕之, 川添良幸
55. Electronic and Optical Properties of the Al₂O₃-doped SiO₂ 752
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.58
 Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe
56. 粒径分布のあるサイトパーコレーションの臨界現象 753
 第 114 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2007 年秋季)
 東北大学金属材料研究所 (2007.11.29-30) p.88
 佐原亮二, 水関博志, 蟹江澄志, 村松淳司, 川添良幸
57. 第一原理計算による Ti, Zr, Hf 水素化物の弾性特性 754
 材料における水素有効利用研究会 平成 19 年度研究会
 鹿児島県, 屋久島 (2007.12.6-8) p.24
 佐原亮二, 土屋 文, 水関博志, 永田晋二, 四竈樹男, 川添良幸
58. 水素クラスレートハイドレートの物理的および化学的性質:エネルギー貯蔵
 利用の観点からの理論的考察 755
 材料における水素有効利用研究会 平成 19 年度研究会
 鹿児島県, 屋久島 (2007.12.6-8) p.25
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, 水関博志, V. R. Belosludov, 川添良幸
59. Electron-phonon Scattering and Quantum transport in Carbon Nanotubes 756
 KINKEN-WAKATE 2007
 4th Materials Science School for Young Scientists
 “Energy-related and Environmental Materials”
 Akiu, Sendai (2007.12.12-14) p.132
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

60. Unified Interpretation of Hund's First and Second Rules for Atoms..... 757
KINKEN-WAKATE 2007
4th Materials Science School for Young Scientists
“Energy-related and Environmental Materials”
Akiu, Sendai (2007.12.12-14) p.154
Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
61. ホウ化物の弾性特性に関する理論研究..... 758
第2回日本フラックス成長研究発表会
東北大学金属材料研究所 (2007.12.14) pp.119-120, No.1O12
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. アーク溶融法によるペロブスカイト型 RPd_3B (R=希土類元素) の合成および
評価..... 760
第2回日本フラックス成長研究発表会
東北大学金属材料研究所 (2007.12.14) pp.162-163, No.1P31
宍戸統悦, 葉 金花, 佐々木孝彦, 岡田 繁, 工藤邦男, 飯泉清賢,
澤田 豊, 石沢芳夫, 森 孝雄, 田中雅彦, 野木直行, 佐原亮二,
湯蓋邦夫, ビジャイ クマール, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎,
小原和夫, 手嶋勝弥, 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄
63. ナノ単結晶粒子から成る ZnO ファイバーの作製および可視光応答光触媒能..... 762
第2回日本フラックス成長研究発表会
東北大学金属材料研究所 (2007.12.14) pp.166-167, No.1P33
宍戸統悦, 松永敬浩, 小中 尚, 稲葉克彦, 湯蓋邦夫, 野村明子, 佐原亮二,
佐藤友章, 佐々木正明, 関 成之, 川添良幸, 中嶋一雄, 羽賀浩一

64. 溶解金属フラックス法による新化合物 $\text{PrRh}_{4.8}\text{B}_2$ の単結晶育成および評価…………… 764
 第2回日本フラックス成長研究発表会
 東北大学金属材料研究所 (2007.12.14) pp.168-169, No.1P34
 宍戸統悦, 奥 正興, 岡田 繁, 野木直行, 天野忠昭, 葉 金花,
 森 孝雄, 田中雅彦, 島村清史, 吉川 彰, 佐原亮二, 湯蓋邦夫,
 ビジャイ クマール, 野村明子, 菅原孝昌, 戸澤慎一郎, 小原和夫,
 大津直史, 林 好一, 藤原航三, 宇佐美德隆, 古曳重美, 手嶋勝弥,
 大石修治, 川添良幸, 中嶋一雄

<2008年>

1. *Ab initio* Description of Properties of Quantum Dots with Novel Structure…………… 766
 WPI & IFCAM Joint Workshop
 “Challenge of Interdisciplinary Materials Science to Technological
 Innovation of the 21st Century”
 Tohoku Univ. (2008.2.18-19) p.70, No.P-28
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, V. Kumar, A. Kasuya and Y. Kawazoe
2. Site-Percolation Models Including Two Different Sizes of Particles on a Square
 Lattice…………… 767
 WPI & IFCAM Joint Workshop
 “Challenge of Interdisciplinary Materials Science to Technological
 Innovation of the 21st Century”
 Tohoku Univ. (2008.2.18-19) p.71, No.P-29
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kiyoshi Kanie, Kaoru Ohno,
 Atsushi Muramatsu and Yoshiyuki Kawazoe
3. Electronic Band Structure of Bulk Tin Dioxide Depending on the Concentration of
 Defects…………… 768
 WPI & IFCAM Joint Workshop
 “Challenge of Interdisciplinary Materials Science to Technological
 Innovation of the 21st Century”
 Tohoku Univ. (2008.2.18-19) p.92, No.P-50
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura

4. Electronic and Optical Properties of the Al₂O₃ Doped SiO₂ 769
 WPI & IFCAM Joint Workshop
 “Challenge of Interdisciplinary Materials Science to Technological
 Innovation of the 21st Century”
 Tohoku Univ. (2008.2.18-19) p.108, No.P-66
 Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe
5. Atomic Structures of Graphene Adatom and its Aggregation 770
 第34回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム
 名城大学 (2008.3.3-5) No.2P-22
 Tomofumi Hashi and Mineo Saito
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 771
 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2回公開シンポジウム
 愛知県岡崎市 (2008.3.4-5) pp.44-46
 川添良幸
7. *Ab initio* Interpretation of Hund's Rules and the Analysis of Correlation in
 Consistency with the Virial Theorem..... 774
 グローバル COE プログラム: 東北大学「材料インテグレーション
 国際教育研究拠点」若手研究者研究報告会
 仙台 (2008.3.14) p.21
 Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
8. 磁場中の超伝導ネットワークの磁化..... 775
 日本物理学会 第63回年次大会
 近畿大学 東大阪キャンパス(2008.3.22-26) No.23aWA-9
 佐藤 修, 加藤 勝

9. 含ケイ素共役系新奇ビルディングブロックとしての平面 4 配位ケイ素の安定化..... 776
日本化学会第 87 春季年会
立教大学 (2008.3.26-30) No.1E3-32
高橋まさえ, シーベルトデネシ, 川添良幸
10. 第一原理計算による籠状シルセスキオキサン(POSS)の熱特性の研究..... 777
日本化学会第 87 春季年会
立教大学 (2008.3.26-30) No.2B1-47
阿部 弘, 野手竜之介, 高橋まさえ, 川添良幸
11. シリコン表面に担持された単原子層白金クラスターの幾何構造と電子構造に関する第一原理計算ならびに STM 観測..... 778
日本化学会第 87 春季年会
立教大学 (2008.3.26-30) No.4D2-05
Palanichamy Murugan, 安松久登, 早川鉄一郎, 近藤 保, 川添良幸
12. Evaluation of Cyclodextrin as Anticancer Drug Carrier by Computer Simulation..... 779
日本化学会第 87 春季年会
立教大学 (2008.3.26-30) No.4E3-31
A. Suvitha, R.V. Belosludov, M. Takahashi and Y. Kawazoe
13. Hydrogen Dissociation on Platinum Clusters: A Theoretical Study..... 780
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.168, No.S7-25
M. Khazaei, V. Kumar, M. S. Bahramy, A. Ranjbar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

14. First-Principles Calculations of Hyperfine Structure in *M* Doped S₁₆H₁₆ Fullerene Cages: *M*=Cr, Mn, and Fe..... 780
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.168, No.S7-26
M. S. Bahramy, V. Kumar, M. Khazaei, A. Ranjbar, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
15. Phase Diagram of Hydrogen Clathrate Hydrate: Application for Hydrogen Storage 781
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.169, No.S7-27
R. V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸, O. S. Subbotin and V. R. Belosludov
16. Ti, Zr, Hf 水素化物の弾性特性に関する理論研究..... 781
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.169, No.S7-28
佐原亮二, 土屋 文, 水関博志, 永田晋二, 四竈樹男, 川添良幸
17. 粒径分布のあるサイトパーコレーションの臨界現象 782
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.373, No.517
佐原亮二, 水関博志, 蟹江澄志, 大野かおる, 村松淳司, 川添良幸
18. Defect Concentration and Electronic Structure of Bulk Tin Dioxide 782
日本金属学会 2008 年春期 (第 142 回) 大会
武蔵工業大学 (2008.3.26-28) p.376, No.527
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura

VI. 新聞記事

<2005年>

1. 奈米新技術－東元研發 FED 顯示器 783
台湾 經濟日報 (2005.11.4)

<2007年>

1. 仙台を本格的拠点に 784
河北新報 (2007.9.26)
2. 産科、ナノテク、金融・・・数学 他分野へ活用の動き 785
読売新聞 (2007.11.21)
3. 東北大・企業の最前線紹介－仙台発の科学雑誌発売－ 786
河北新報 (2007.12.7)

VII. 雑誌等掲載解説記事

<2005年>

1. 『奈米新技術－東元研發 FED 顯示器 (科技新聞)』 787
蕃薯藤 News (2005.11.4)

<2006年>

1. 『研究バンザイ！～思うことあれこれ～ 第2回～第12回』 788
国際技術情報誌 M&E (2006.5.1～2007.3.1)
川添良幸
2. 『ニイウス、東北大学金属材料研究所に商業用小型スーパーコンピューター
を納入』 799
日本経済新聞社 NIKKEI NET (2006.12.7)
3. 『東北大学金属材料研究所、ニイウスの商業用小型スーパーコンピューター
「NIWS Gene/S Turbo」を採用』 800
CNET Japan (2006.12.7)

<2007年>

1. 『ものづくりのための「現場数学」 第1回～第12回』 801
国際技術情報誌 M&E, (2007.4.1～2008.3.1)
川添良幸
2. 『日本全国で燃えるベンチャー魂／東北－東北の基礎研究を基盤とする元
気なベンチャー企業－』 813
社団法人 日本半導体ベンチャー協会誌
JASVA magazine, 第26号 (2007 Spring) pp.4-5
川添良幸
3. 『ナノシミュレーション技術－ナノテクノロジーを支える最先端技術－』 815
電気学会誌, Vol.127 No.6 (2007) pp.348-351
川添良幸
4. 『スーパーコンピューティングシステムの更新』 819
IMR ニュース KINKEN, Vol.53 2007 SUMMER (2007.6) p.10
水関博志
5. 『スーパーコンピュータを駆使した医療用ナノ材料の設計－ナノメディシ
ンが目指す未来－』 820
化学, 62 [7] (2007) pp.42-45
川添良幸
6. 『ProCurve Networking による基幹ネットワーク導入事例』 824
日本ヒューレット・パッカー株式会社お客様事例 (2007.7)
7. 『Effects of Morphology and Doping on the Electronic and Structural Properties of
Hydrogenated Silicon Nanowires』 829
KINKEN Research Highlights, 2007, p.4
Yoshiyuki Kawazoe
8. 『First Principles Approach: Single Molecular Transistor Modulated by Transverse
Field』 830
KINKEN Research Highlights, 2007, p.34
Ryunosuke Note

9. 『Two-Stage Rotation Mechanism for Group-V Precursor Dissociation on Si(001)』 831
 KINKEN Research Highlights, 2007, p.60
 Jian-Tao-Wang
10. 『大規模スーパーコンピュータの活用を支える TCO に優れた 10 ギガビット
 基幹ネットワーク』 832
 日経 BP 社 NIKKEI BP net IT pro SPECIAL
 デイルバートの強い会社の法則 Vol.6 (2007)
11. 『磁性の本質は交換相互作用ではなく、原子核-原子相互作用』 836
 IMR ニュース KINKEN, Vol.54 2007 AUTUMN (2007.10) p.2
 川添良幸
12. 『ホヤゲノム』 837
 テクノフロップス, 第 3 号 (2007.11.15) p.2
 川添良幸
13. 『有機-無機ハイブリッド材料の熱的特性評価』 839
 金属ガラス総合研究センターニュース, Vol.6 (2007.11.26) p.4
 阿部 弘
 (客員教授, 積水化学工業株式会社, 積水インテグレートドリサーチ)
14. 『学生本位の魅力ある大学づくりの成功の鍵』 840
 第 3 回 大学 CIO フォーラム 大学革新のための CIO の役割
 ～IT を生かした学生本位の大学経営を考える～ SESSION 2
 エデュステーションマガジン
 マイクロソフト教育ソリューション情報誌 (2007 WINTER) pp.12-13
15. 『第一原理計算による希土類ロジウムホウ化物および炭化物の弾性特性』 842
 ナノ学会会報, 第 6 巻 第 1 号 (2007) pp.9-15
 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
16. 『ナノ学会会報 表紙図』 849
 ナノ学会会報, 第 6 巻 第 1 号 (2007)
 佐原亮二

17. 分子デバイスに向けた有機分子/金属界面設計 850

MATERIALS INTEGRATION

INTERMATERIAL (2007.Vol.20 No.10) pp.49-54

水関博志, 川添良幸

<2008年>

1. 『Preface』 856

The Second General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)

Sendai, Matsushima, Japan (2008.1.26-28)

Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Mizuseki and Ryoji Sahara

2. 『平成19年度機器・分析技術研究会が開催されました』 857

テクニカルセンターニュース, No.2 (2008.2) P.7 諸報より

3. 『第一原理計算による有機結晶のテラヘルツ格子振動』 858

分光研究, 第57巻 第1号 (2008) pp.12-22

斎藤繁喜, タルガット インネルバエブ, 水関博志, 五十嵐伸昭,

野手竜之介, 川添良幸

4. 『名物先生 本多光太郎先生』 869

化学フォーラム 東京理科大学出版会 (2008) 4月号

川添良幸

VIII. 書籍

<2006年>

1. 『Advances in Materials Research Vol.7 – Characterization of Corrosion Products
on Steel Surfaces –』

Springer (2006)

Series Editor in Chief Yoshiyuki Kawazoe

Editors Y. Waseda and S. Suzuki

<2007 年>

1. 『Oscillatory Convection of LiCaAlF₆ Melt in Czochralski Model』…………… 871
“Studies on Flow Instabilities in Bulk Crystal Growth”,
Transworld Research Network (2007) Chapter 3, pp.39-56
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
2. 『Theoretical Advances in the Electronic and Atomic Structures of Silicon
Nanotubes and Nanowires』…………… 889
“Nanosilicon”, ELSEVIER (2007.8) Chapter 6, pp.217-257
Abhishek Kumar Singh, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
3. 『Advances in Materials Research Vol.8 – Shaped Crystals –』
Springer (2007)
Series Editor in Chief Yoshiyuki Kawazoe
Editors T. Fukuda and V.I. Chani
4. 『Calculating Transport Properties of Nanometer-Scale Systems: Nanodevice
Applications of Carbon Nanotubes and Organic Molecules』
“Nanostructures - Fabrication and Analysis”,
Springer (2007) Chapter 6, pp.217-249
Amir A. Farajian, Rodion V. Belosludov, Olga V. Pupysheva, Hiroshi Mizuseki
and Yoshiyuki Kawazoe

<2008 年>

1. 『Preface』…………… 930
“Advances in Materials Research Vol.9—Nano- and Micromaterials—”,
Springer (2008.1)
Kaoru Ohno, Masatoshi Tanaka, Jun Takeda and Yoshiyuki Kawazoe
2. 『*Ab Initio* GW Calculations Using an All-Electron Approach』…………… 932
“Advances in Materials Research Vol.9—Nano- and Micromaterials—”,
Springer (2008.1) Chapter 6, pp.171-187
S. Ishii, K. Ohno and Y. Kawazoe

3. 『Green's Function Formulation of Electronic Transport at Nanoscale』 950
 “Advances in Materials Research Vol.9—Nano- and Micromaterials—”,
 Springer (2008.1) Chapter 8, pp.219-241
 A. A. Farajian, O. V. Pupysheva, B. I. Yakobson and Y. Kawazoe
4. 『Thermodynamic Properties of Materials Using Lattice-Gas Models with
 Renormalized Potentials』 973
 “Advances in Materials Research Vol.9—Nano- and Micromaterials—”,
 Springer (2008.1) Chapter 11, pp.275-290
 R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno and Y. Kawazoe
5. 『第一原理シミュレーション計算の概要と代替材料開発への適用』 989
 “レアメタルの代替材料とリサイクル”
 シーエムシー出版 (2008.3.10) 第3章7項 pp.221-229
 川添良幸, 水関博志, 佐原亮二
6. Realization of a Computer Simulation Environment Based on ITBL and a Large
 Scale GW Calculation Performed on This Platform 998
 “Lecture Notes in Computer Science—High-Performance Computing—”
 No.4759 (2008.3) Chapter 5, pp.427-433 (APC2005)
 Springer
 Yoshiyuki Kawazoe, Marcel Sluiter, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki,
 Amit Jain, Kaoru Ohno, Soh Ishii, Hitoshi Adachi and Hiroshi Yamaguchi

IX. 表彰・授与

1. 『ACCMS AWARD』 1005
 Chair of the International Committee of ACCMS
 Seoul, Korea (2007.9.14)
 Dr. Yoshiyuki Kawazoe
2. 『ITBL 活用スーパーコンピューター広域連携シミュレーション環境構築と
 ナノテクノロジー用超大規模計算実行』 1006
 日立 IT ユーザ会 第44回大会 (2007.7.26) 「一般論文優秀賞」
 川添良幸, 水関博志, 一関京子

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 1019
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 1020
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 1024
4. 東北大学金属材料研究所構内図 1027
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図 1028