

2008 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

(2008 年 4 月～2009 年 3 月)

目 次

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

・ スーパーコンピューターへの責任・・・・・・・・・・・・・・・・・・川添良幸

I. 研究内容概要

1. 直線型メタル置換ジシリル・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1
東北大学金属材料研究所 高橋まさえ, 川添良幸
2. パーコレーションモデルを用いた電導薄膜の材料設計・・・・・・・・ 6
東北大学金属材料研究所 志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
3. Molecular Dynamics Simulations of Nano-Size Effects in Ferroelectric Memories..... 9
IMR, Tohoku University Takeshi Nishimatsu, Masaya Iwamoto and
Yoshiyuki Kawazoe
4. An Atomistic Level Description and Design of Novel Core/Shell QDs by *Ab Initio*
Calculations 11
IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India V. Kumar
Center for Interdisciplinary Research, Tohoku University A. Kasuya
University of Minnesota Duluth, USA V. Nemykin

5.	An Atomistic Modeling and Description of Amorphous and Glass Materials	14
	IMR, Tohoku University R.V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and A. Inoue Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia O. S. Subbotin and V. R. Belosludov WPI-AIMR, Tohoku University D. V. Louzguine-Luzgin	
6.	Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphene Producing Starlike STM Images	16
	IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Mohammad S. Bahramy, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe	
7.	First-Principles Calculations of Hyperfine Structure in <i>M</i> Doped Si ₁₆ H ₁₆ Fullerene Cages: <i>M</i> = Cr, Mn, and Fe	18
	IMR, Tohoku University Mohammad Saeed Bahramy and Y. Kawazoe Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar	
8.	Materials for Hydrogen Storage	20
	IMR, Tohoku University Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe	
9.	Computational Study of Oligomeric Hematoporphyrin “Photosensitizer”	25
	IMR, Tohoku University A. Suvitha, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe Dept. of Surgical Oncology, Tohoku University School of Medicine N.Ohuchi	
10.	Controlled Release of Oxaliplatin using Oxaliplatin-Cucurbituril[n] Complexes	28
	IMR, Tohoku University A. Suvitha, N. S. Venkataramanan, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe Dept. of Surgical Oncology, Tohoku University School of Medicine N.Ohuchi	
11.	Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium	30
	IMR, Tohoku University G. Chen, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe	

12. Spin and Band Gap Engineering in Doped Graphene Nanoribbons	34
IMR, Tohoku University Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe	
Dep. of Mechanical and Materials Engineering, Wright State University,	
Dayton, USA Amir A. Farajian	
Dep. of Physics, University of California, Santa Cruz, USA	
Keivan Esfarjani	
13. <i>Ab-Initio</i> Study of the Opto-Electronic Properties of the Oxidized Indium Tin Oxide ·	36
IMR, Tohoku University M. N. Tripathi, Hiroshi Mizuseki and	
Yoshiyuki Kawazoe	
14. 対分布関数による He 原子励起状態の Hund スピン多重度則の研究.....	38
東北大学金属材料研究所 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋	
15. Simulation of Water Flow Through Carbon Nanotube Using Artificial Neural	
Network	42
IMR, Tohoku University Samad Ahadian and Yoshiyuki Kawazoe	
16. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer,	
Dimers, Trimers and Tetramers on Graphene.....	44
IMR, Tohoku University Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy,	
Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe	
17. Dynamics of H ⁺ Transport in Hydrated Proton Exchange Membrane for PEMFC by	
Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics UA-QCMD Method.....	45
IMR, Tohoku University Maaouia Souissi and Yoshiyuki Kawazoe	
18. The Kinetics of Lithium Atoms in LiBH ₄	46
IMR, Tohoku University Qi Peng and Yoshiyuki Kawazoe	
19. “Bonding and Magnetism of Graphene (Large Polyaromatic Hydrocarbon PAH)	
Molecules”, “Quantum Monte Carlo Calculations of Electronic Structure of Molecules	
and Solids”	47
University of California, Berkeley, USA Michael R Philpott	
IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe	

20. Thermodynamics and Hydrogen Storage Ability of Hydrogen Clathrate Hydrate..... 51
 Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia
 V. R. Belosludov and O. S. Subbotin
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
21. Novel Growth Behavior of Pt Clusters and Their Electronic Structure 53
 Dr. Vijay Kumar Foundation, Chennai, India Vijay Kumar
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
22. Magnetism and Spin Induced Transport in Carbon Nanotubes Doped with Fe/Co
 Nanoparticles 55
 Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Kolkata, India
 S. Ghosh and G. P. Das
 IMR, Tohoku University M. S. Bahramy and Y. Kawazoe
23. FePt 合金のポテンシャル繰り込み理論と ${}^7\text{Be}@C_{60}$ の半減期 57
 横浜国立大学工学部 大野かおる, 石井 聡
 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, 水関博志, 佐原亮二
24. Theoretical Study of Phase Transitions in Kr and Ar Clathrate Hydrates from
 Structure II to Structure I under Pressure 59
 Institute of Inorganic Chemistry, SB RAS, Novosibirsk, Russia
 O. S. Subbotin and V. R. Belosludov
 IMR, Tohoku University R. V. Belosludov and Y. Kawazoe
25. Reducible and Non-Reducible Defect Clusters in Tin-Doped Indium Oxide 61
 IMR, Tohoku University Talgat M. Inerbaev and Yoshiyuki Kawazoe
26. Structural, Electronic and Optical Properties of the SiO_2 -Based System..... 66
 IMR, Tohoku University Yong Yang, Masae Takahashi and
 Yoshiyuki Kawazoe
 Sekisui Chemical Co., Ltd. and Sekisui Integrated Research Inc., Japan
 Hiroshi Abe

27. Highly Stable and Symmetric Boron Caged B@Co₁₂@B₈₀ Core-Shell Cluster 68
 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, China Jian-Tao Wang,
 E. G. Wang, Ding-Sheng Wang
 Depr. Physics, University of Nevada, USA C. F. Chen
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
28. Global Simulation of Crystal Czochralski Growth..... 69
 Dep. of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing, China
 Z. Zeng and S. Z. Zhang
 IMR, Tohoku University H. Mizuseki and Y. Kawazoe
29. Magnetism of ZnO Induced by Dopant and Vacancy and Defect 73
 Dept. Adv. Mater. Nanotechnol., Peking University, China Qiang Sun
 Dept. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qian Wang and Puru Jena
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
30. Design of Nanostructures for Hydrogen Storage..... 76
 Dept. Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, USA
 Qian Wang and Puru Jena
 Dept. Adv. Mater. Nanotechnol., Peking University, China Qiang Sun
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
31. Doping Induced Anisotropic Reaction and Growth in C₆₀..... 81
 Dept. Adv. Mater. Nanotechnol., Peking University, China Jian Zhou,
 Miaomiao Wu and Qiang Sun
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe
32. *Ab Initio* Study of Edge Functionalization Effects on Electronic Transport Through
 Graphene Nanoribbons 84
 Dep. of Mechanical and Materials Engineering, Wright State University,
 Dayton, USA A. A. Farajian and O. V. Pupyshva
 IMR, Tohoku University N. Gorjizadeh and Y. Kawazoe

33. Interaction of Aromatic Amino-acids with Graphene and SWCNT..... 86
 Bhabha Atomic Research Centre, Mumbai, INDIA Chinagandham Rajesh
 and Chiranjib Majumder
 IMR, Tohoku University Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
34. Numerical Calculations of Current through Single Conjugated Molecules..... 100
 Dept. of Physics, Fudan University, Shanghai, China Y. Y. Liang,
 Y. X. Zhou and H. Chen
 IMR, Tohoku University R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
35. First Principle Studies on Single Walled Carbon Nanotubes for Hydrogen Storage
 and Drug Delivery 103
 School of Physics, Madurai Kamaraj University, India K. Iyakutti,
 M. Rajarajeswari and V. J. Surya
 IMR, Tohoku University Y. Kawazoe and N. S. Venkataramanan
36. Designing Nanogadget for Nanoelectronic Device by Carbon Nanotubes 108
 Corporate R&D Center, LG Chem, Ltd Sang Uck Lee
 IMR, Tohoku University Mohammad Khazaei, Rodion V. Belosludov,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
 G-COE Laboratory, Dep. of Applied Chemistry, Graduate School of
 Engineering, Tohoku University Fabio Pichierri
37. First Principles Calculation Study on Catalytic Reaction for Fuel Cells..... 110
 R & D Division, Hitachi Maxell, Ltd. Susumu Imai and Norio Ota
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
38. 並列アルゴリズムによるナノスケール物質安定構造の探索 111
 弘前大学理工学研究科 種田晃人
 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ビーライト(C₂S)の結晶構造解析 112
 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 鵜沢正美
 東北大学金属材料研究所 川添良幸

40. 炭素物質の磁性と生体分子のシミュレーション…………… 115
 金沢大学大学院自然科学研究科 齋藤峯雄, 石井史之
 東北大学金属材料研究所 川添良幸
41. 分子吸着コバルトクラスターの赤外光解離分光 — 振動および電子遷移…………… 116
 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
42. 第一原理計算を用いた熱電材料開発…………… 118
 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
 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
43. 第一原理ポテンシャルを基にしたフォノン計算の応用と拡張…………… 120
 独立行政法人 物質・材料研究機構 齋藤繁喜
 東北大学金属材料研究所 川添良幸
44. 量子化学計算を用いたゴムとフィラーの弱い相互作用力の計算…………… 124
 住友ゴム工業株式会社 濱田賢明, 皆川康久
 東北大学金属材料研究所 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
45. Rh₈ 立方体クラスターの水素吸蔵量…………… 129
 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
46. New Metallic Carbon Crystal…………… 131
 Inst Multidisciplinary Res Adv Mat, Tohoku University Masahiro Itoh
 Math Inst, Grad Sch Sci, Tohoku University Motoko Kotani
 Grad Sch Math, Nagoya University Hisashi Naito
 Dep. of Math, Meiji University Toshikazu Sunada
 IMR, Tohoku University Yoshiyuki Kawazoe
 WPI-AIMR, Tohoku University Tadafumi Adschiri

47. 高温超伝導体における固有ジョセフソン効果.....	136
東北大学金属材料研究所 小山富男	
48. 事前曲げ歪効果のNb ₃ Sn, MgB ₂ およびY系複合超伝導線への適用性に関する研究.....	138
岡山大学自然科学研究科 村瀬 暁, 延原正彦	
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	
49. プルトニウム酸化物燃料物性の電子論的研究.....	143
東北大学金属材料研究所 小無健司, 川添良幸, 三宅真紀	
株式会社 CRC ソリューションズ 源 聡	
独立行政法人 日本原子力研究開発機構 加藤正人	
50. ウラン6価錯体における4座テトラケトン配位子のキレート効果.....	147
東北大学金属材料研究所 山村朝雄, 古谷 昌, 大田 卓, 佐藤香織, 佐藤伊佐務	
東北大学多元物質科学研究所 桐島 陽	
51. 三次元有限要素解析によるSiバルク多結晶の粒界の方位関係とせん断応力との関係.....	153
東北大学金属材料研究所 高橋 勲, 宇佐美徳隆, 沓掛健太郎, 森下浩平, 中嶋一雄	
52. 分子動力学によるイオン液体の電気二重層の研究.....	156
東北大学金属材料研究所 下谷秀和, 岩佐義宏	
53. Ti-29Nb-13Ta-4.6Zr合金製脊椎固定用ロッドの力学的生体適合性.....	157
東北大学大学院工学研究科 成田健吾	
東北大学金属材料研究所 新家光雄, 仲井正昭, 赤堀俊和, 堤 晴美	
昭和医科工業株式会社 織部一弥	

54. Atomic Scale Modeling of the Dislocation Structure of {110} Twist Grain Boundaries in α -Iron..... 160
 Cyclotron Radioisotope Center, Tohoku University J. B. Yang
 The Oarai Center, IMR, Tohoku University Y. Nagai and M. Hasegawa
 Oak Ridge Natl Lab, Mat Sci & Technol Div, Oak Ridge, USA
 Yu. N. Osetsky
55. Ni-Nb-Sn 金属ガラス中の Sn 周りの原子局所構造..... 168
 東北大学 WPI 藤田武志, 陳 明偉
 東北大学金属材料研究所 W. Zhang, Q. S. Zhang
 宮城工業高等専門学校 今野一弥, 松浦 真
56. Vibrational Properties in FeAs-Based Superconductor: Study by First-Principles Calculation..... 170
 WPI-AIMR, Tohoku University Zhang Ling, Guan Pengfei and
 Chen Mingwei
57. 融液内三次元非定常熱対流を考慮した CZ 炉総合熱解析..... 173
 東北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

II. 原著論文

<2008 年>

1. Transport Properties of Nanoscale Materials for Molecular Wire Applications: A Case Study of Ferrocene Dimers..... 177
J. Korean. Phys. Soc., **52**[4] (2008) pp.1197-1201
Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, Tomoki Uehara, Sang Uck Lee and Yoshiyuki Kawazoe
2. Temperature Dependence of the Bulk Modulus in fcc Metals by Using a Lattice-Gas Model with Renormalized Potentials..... 182
J. Korean. Phys. Soc., **52**[4] (2008) pp.1259-1263
Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno
3. Designing Nanogadgets by Interconnecting Carbon Nanotubes with Zinc Layers..... 187
ACS NANO, **2**[5] (2008) pp.939-943
Mohammad Khazaei, Sang Uck Lee, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe
4. Transition Metal Sandwich Molecules with Large (C_n , n geqslant 24) Zigzag Poly Aromatic Hydrocarbons..... 192
Chem. Phys., **348**[1-3] (2008) pp.69-82
Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
5. Lithiated Assemblies of Metal Chalcogenide Nanowires..... 206
Appl. Phys. Lett., **92**[20] (2008) pp.2031121-2031123
P. Murugan, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe and Norio Ota
6. Atomic Ordering Recognized by Convergence Characteristics of the Radial Distribution Function..... 209
Solid State Commun., **146**[11-12] (2008) pp.468-471
Yong Yang, Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
7. Vacancy-Induced Magnetism in ZnO Thin Films and Nanowires..... 213
Phys. Rev. B, **77**[20] (2008) pp.2054111-2054117
Qian Wang, Qiang Sun, Gang Chen, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena

8. Evolution of Atomic and Electronic Structure of Pt Clusters: Planar, Layered, Pyramidal, Cage, Cubic, and Octahedral Growth..... 220
 Phys. Rev. B, **77**[20] (2008) pp.20541801-20541810
 Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe

9. Current through Single Conjugated Molecules: Calculations Versus Measurements.... 230
 J. Chem. Phys., **129**[2] (2008) pp.0249011-0249015
 Y. Y. Liang, Y. X. Zhou, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

10. The Role of Aromaticity and the π -Conjugated Framework in Multiporphyrinic Systems as Single-Molecule Switches 235
 Small, **4**[7] (2008) pp.962-969
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

11. Effect of Excess Electrons on Hexagonal Close-Packed Mg and the Model Clusters for Bulk Metallic Glasses..... 243
 J. Phys. D: Appl. Phys., **41**[15] (2008) pp.1554241-1554246
 Masae Takahashi, Mikio Fukuhara, Akihisa Inoue and Yoshiyuki Kawazoe

12. Interaction of Gas Molecules with Ti-Benzene Complexes..... 249
 J. Chem. Phys., **129**[7] (2008) pp.0743051-0743058
 G. Chen, P. Jena and Y. Kawazoe

13. Electron Transport through Carbon Nanotube Intramolecular Heterojunctions with Peptide Linkages..... 257
 Phys. Chem. Chem. Phys., **10**[34] (2008) pp.5225-5231
 Sang Uck Lee, Mohammad Khazaei, Fabio Pichierri and Yoshiyuki Kawazoe

14. Excess Polarizabilities upon the First Dipole-Allowed Excitation of Some Conjugated Oligomers 264
 J. Phys. Org. Chem., **21**[9] (2008) pp.789-796
 J. F. Ye, H. Chen, R. Note, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

15. Effect of Strain on the Energetics and Kinetics of Dissociation of Sb_4 on $\text{Ge}(001)$ 272
 Phys. Rev. B, **78**[7] (2008) pp.0734031-0734034
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang,
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe
16. Metal-Substituted Disilynes with Linear Forms..... 276
 Organometallics, **27**[19] (2008) pp.4829-4832
 Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
17. Fast Molecular-Dynamics Simulation for Ferroelectric Thin-Film Capacitors Using
 a First-Principles Effective Hamiltonian 280
 Phys. Rev. B, **78**[10] (2008) pp.10410401-10410411
 Takeshi Nishimatsu, Umesh V. Waghmare, Yoshiyuki Kawazoe and
 David Vanderbilt
18. Electron-Capture Decay Rate of $^7\text{Be}@C_{60}$ by First-Principles Calculations Based on
 Density Functional Theory..... 291
 Phys. Rev. B, **78**[12] (2008) pp.1254161-1254167
 Tsuguo Morisato, Kaoru Ohno, Tsutomu Ohtsuki, Kentaro Hirose,
 Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
19. Crystal-Like Low Frequency Phonons in the Low-Density Amorphous and
 High-Density Amorphous Ices..... 298
 J. Chem. Phys., **129**[11] (2008) pp.1145071-1145075
 R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, P. M. Rodger, Y. Kawazoe and
 V. R. Belosludov
20. TD-DFT Studies on Hematoporphyrin and Its Dimers..... 303
 Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2416-2419
 A. Suvitha, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, M. Takeda,
 M. Kohno and N. Ohuchi
21. Structural Dependence of Magnetic Shielding Properties in Al_4Li_4 Clusters..... 307
 Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2429-2436
 Sang Uck Lee, Young-Kyu Han, Chiranjib Majumder, Rodion V. Belosludov,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

22. Magnetic Properties of Mn Doped Armchair Graphene Nanoribbon..... 315
Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2445-2447
Narjes Gorjizadeh and Yoshiyuki Kawazoe
23. Bonding and Magnetism in High Symmetry Nano-Sized Graphene Molecules:
Linear Acenes $C_{4m+2}H_{2m+4}$ ($m = 2, \dots, 25$); Zigzag Hexangulenes $C_{6m*2}H_{6m}$ ($m = 2, \dots, 10$); Crenelated Hexangulenes $C_{6(3m*2-3m+1)}H_{6(2m-1)}$ ($m = 2, \dots, 6$); Zigzag
Triangulenes $C_{m*2+4m+1}H_{6m}$ ($m = 2, \dots, 15$)..... 318
Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2448-2456
Michael R. Philpott, Fanica Cimpoesu and Yoshiyuki Kawazoe
24. Dependence of Magnetism on Doping Concentration in V-Doped Bulk ZnO..... 327
Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2469-2473
Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe
25. Structural, Electronic and Optical Properties of the Al_2O_3 Doped SiO_2 : First
Principles Calculations..... 332
Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2474-2479
Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe
26. Thermocapillary Convection of Liquid Bridge under Axisymmetric Magnetic Fields · 338
Mater. Trans., **49**[11] (2008) pp.2566-2571
Chaobo Chen, Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
27. Electronic Structure of the Bulk of Titanium Hydrides Fractured in Ultrahigh
Vacuum by XPS Surface Analysis 344
J. Surface Analysis, **14**[4] (2008) pp.424-427
B. Tsuchiya, M. Oku, R. Sahara, S. Nagata, T. Shikama and Y. Kawazoe
28. Spin and Band-Gap Engineering in Doped Graphene Nanoribbons 348
Phys. Rev. B, **78**[15] (2008) pp.1554271-1554276
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani
and Yoshiyuki Kawazoe

29. Hydrogen Adsorption on Lithium-Functionalized Calixarenes: A Computational Study..... 354
 J. Phys. Chem. C, **112**[49] (2008) pp.19676-19679
 Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
30. Geometry, Bonding and Magnetism in Planar Triangulene Graphene Molecules with D_{3h} Symmetry: Zigzag $C_{m*2+4m+1}H_{3m+3}$ ($m = 2, \dots, 15$) 358
 Chem. Phys., **354**[1-3] (2008) pp.1-15
 Michael R. Philpott, Fanica Cimpoesu and Yoshiyuki Kawazoe
31. Polarization Switching in Epitaxial Films of BaTiO₃: A Molecular Dynamics Study... 373
 Appl. Phys. Lett., **93**[24] (2008) pp.2429051-2429053
 Jaita Paul, Takeshi Nishimatsu, Yoshiyuki Kawazoe and Umesh V. Waghmare
32. Glass-Transition Behavior of Ni: Calculation, Prediction, and Experiment 376
 J. Appl. Phys., **104**[12] (2008) pp.1235291-1235295
 Dmitri V. Louzguine-Luzgin, Rodion Belosludov, Masatoshi Saito, Yoshiyuki Kawazoe and Akihisa Inoue
33. Specific Heat and TEM Study of the New Layered Boride PrRh_{4.8}B₂ Obtained by the Molten Metal Flux Growth 381
 J. Flux Growth, **3**[2] (2008) pp.61-63
 Toetsu Shishido, Takao Mori, Kunio Yubuta, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima
34. Synthesis, Boron Solubility and Properties of Perovskite-Type Rare Earth Palladium Borides..... 384
 J. Flux Growth, **3**[2] (2008) pp.68-71
 Toetsu Shishido, Jinhua Ye, Takahiko Sasaki, Shigeru Okada, Kunio Kudou, Yoshio Ishizawa, Takao Mori, Yutaka Sawada, Naoyuki Nogi, Masahiko Tanaka, Naofumi Ohtsu, Tadaaki Amano, Ryoji Sahara, Kunio Yubuta, Vijay Kumar, Kozo Fujiwara, Noritaka Usami, Kouichi Hayashi, Akiko Nomura, Takamasa Sugawara, Shigemi Kohiki, Katsuya Teshima, Shuji Oishi, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Nakajima

35. Emission of Terahertz Electromagnetic Wave in Intrinsic Josephson Junction Stacks·· 388
 J. Phys: Conf. Ser., **129** (2008) pp.0120261-0120265
 T. Koyama, H. Matsumoto and M. Machida

36. A Lattice Monte Carlo Simulation of the FePt Alloy Using a First-Principles
 Renormalized Four-Body Interaction·········· 393
 J. Chem. Phys., **128**[23] (2008) pp.2347021-2347025
 Yuji Misumi, Satoru Masatsuji, Ryoji Sahara, Soh Ishii and Kaoru Ohno

<2009 年>

1. The Effects of Defects on the Conductance of Graphene Nanoribbons·········· 398
 Nanotechnology, **20**[1] (2009) pp.0152011-0152016
 Narjes Gorjizadeh, Amir A Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

2. Mg-Doped GaN Nanostructures: Energetics, Magnetism, and H₂ Adsorption ········· 404
 Appl. Phys. Lett., **94**[1] (2009) pp.0131081-0131083
 Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

3. New Metallic Carbon Crystal·········· 407
 Phys. Rev. Lett., **102**[5] (2009) pp.0557031-0557034
 Masahiro Itoh, Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshikazu Sunada,
 Yoshiyuki Kawazoe and Tadafumi Adschiri

4. Stabilization of Square Planar Silicon: A New Building Block for Conjugated
 Si-Containing Systems·········· 411
 J. Phys. Chem. A, **113**[4] (2009) pp.707-712
 D. Szieberth, M. Takahashi and Y. Kawazoe

5. Aluminum Hydride Coated Single-Walled Carbon Nanotube as a Hydrogen Storage
 Medium·········· 417
 Int. J. Hydrogen Energy, **34**[1] (2009) pp.370-375
 K. Iyakutti, Y. Kawazoe, M. Rajarajeswari and V.J. Surya

6. ZnO Clusters: Laser Ablation Production and Time-of-Flight Mass Spectroscopic Study..... 423
Microelectronics J., **40**[2] (2009) pp.218-220
A. Dmytruk, I. Dmitruk, I. Blonskyy, R. Belosludov, Y. Kawazoe and
A. Kasuya

7. Theoretical Study of Hydrogen Storage in Ca-Coated Fullerenes 426
J. Chem. Theory Comput., **5**[2] (2009) pp.374-379
Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

8. Ultra-Stable Nanoparticles in $A_{II}B_{VI}$ ($A_{II} = \text{Cd, Zn}$; $B_{VI} = \text{S, Se, Te}$) Compounds..... 432
J. Nanosci. Nanotechnol., **9**[3] (2009) pp.2111-2118
V. R. Romanyuk, I. M. Dmitruk, Yu. A. Barnakov, R. V. Belosludov and
A. Kasuya

9. Comparative Study of Single Cu, Ag, Au, and K Atoms Adsorbed on Si(111)-(7×7)·· 440
Phys. Rev. B, **79**[11] (2009) pp.1153011-1153019
G. Chen, Xudong Xiao, Y. Kawazoe, X. G. Gong and C. T. Chan

10. Magnetic Properties of Transition-Metal-Doped $\text{Zn}_{1-x}\text{T}_x\text{O}$ ($T = \text{Cr, Mn, Fe, Co, and Ni}$) Thin Films with and without Intrinsic Defects: A Density Functional Study..... 449
Phys. Rev. B, **79**[11] (2009) pp.11540701-11540713
Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Y. Kawazoe

11. Potential of AlN Nanostructures as Hydrogen Storage Materials..... 462
ACS NANO, **3**[3] (2009) pp.621-626
Qian Wang, Qiang Sun, Puru Jena and Yoshiyuki Kawazoe

12. Observation of Birefringence in BBO Crystals in the Terahertz Regime..... 468
J. Crystal Growth, **311**[3] (2009) pp.895-898
Shigeki Saito, Elmer Estacio, Tomoharu Nakazato, Yusuke Furukawa,
Toshihiko Shimizu, Nobuhiko Sarukura, Marilou Cadatal, Minh Hong Pham,
Carlito Ponceca Jr., Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

13. A Theoretical Study on the Interaction of Aromatic Amino Acids with Graphene and Single Walled Carbon Nanotube..... 472
 J. Chem. Phys., **130**[12] (2009) pp.1249111-1249116
 Chinagandham Rajesh, Chiranjib Majumder, Hiroshi Mizuseki and
 Yoshiyuki Kawazoe
14. Geometry and Bonding in the Ground and Lowest Triplet State of D_{6h} Symmetric Crenellated Edged $C_{6[3m(m-1)+1]}H_{6(2m-1)}$ ($m = 2, \dots, 6$) Graphene Hydrocarbon Molecules..... 478
 Chem. Phys., **358**[1-2] (2009) pp.85-95
 Michael R. Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
15. パーコレーションモデルを用いた電導薄膜の材料設計：インジウム使用量削減をめざして 489
 日本金属学会誌 **73**[3] (2009) pp.171-173
 志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
16. Calculations of Thermodynamic Properties of PuO_2 by the First-Principles and Lattice Vibration 492
 J. Nuclear. Mater., **385**[1] (2009) pp.18-20
 Satoshi Minamoto, Masato Kato, Kenji Konashi and Yoshiyuki Kawazoe
17. Highly Stable and Symmetric Boron Caged $B@Co_{12}@B_{80}$ Core-Shell Cluster 495
 Appl. Phys. Lett., **94**[13] (2009) pp.1331021-1331023
 Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang,
 H. Mizuseki and Y. Kawazoe

Ⅲ. 国際会議発表論文

<2007年>

1. Quality Assurance for Computational Materials Science: What is the major factor in Hund's spin-multiplicity rule for atoms and molecules? 499
Proceedings of the 17th Iketani Conference: The Doyama Symposium on Advanced Materials
Tokyo, Japan (2007.9.5-8) pp.428-431, No.7A1-1 (Invited)
Takayuki Oyamada, Youhei Maruyama, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara

<2008年>

1. *Ab Initio* Description of the Quantum Dot with Novel Core structure and their Interaction with Organic Ligand 503
Particles 2008
Orlando, Florida, USA (2008.5.10-13) pp.106-107, No.167 (Oral)
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe
2. Design of Nanoscale Materials for Molecular Devices by First Principles and Genetic Algorithm Approaches 504
The 19th International Conference on Molecular Electronics & Devices
Ajou University, Suwon, Korea (2008.5.29-30) pp.55-56, No.O-1
H. Mizuseki, N. Igarashi, R. Hayashi, R. V. Belosludov, S. -U. Lee and Y. Kawazoe
3. Theoretical Investigations of Multiporphyrinic Systems as Single-Molecule Switches 506
The 19th International Conference on Molecular Electronics & Devices
Ajou University, Suwon, Korea (2008.5.29-30) pp.59-60, No.O-3
S. U. Lee, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

4. Designing Nanogadget for Nanoelectronic Device by Nitrogen-Doped Capped Carbon Nanotubes..... 508
 The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience
 Tokyo, Japan (2008.6.3-7) No.2P-CMP01 (Poster)
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

5. *Ab Initio* Calculations can be Quality Assured —Hund’s Multiplicity Rule and Virial Theorem— 509
 Proceedings of the 4th International Symposium on the Marine Biotechnology and Advanced Materials
 Kangnung National University, Gangneung, Korea (2008.6.12-13) pp.172-175
 Y. Kawazoe, T. Oyamada, Y. Maruyama, K. Hongo and H. Yasuhara

6. First-Principles Calculations of Many-Body States for the Single Nitrogen- Vacancy Defect in Diamond..... 513
 Ninth International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08)
 Le Corum, Montpellier, France (2008.6.29-7.4)
 A. Ranjbar, M. Heidari Saani, K. Esfarjani and Y. Kawazoe

7. Effect of Excess Electrons on Hexagonal Close-Packed Mg and the Model Clusters for Bulk Metallic Glasses..... 514
 International Conference on Nanoscience + Technology (ICN+T 2008)
 Keystone, USA (2008.7.20-25)
 M. Takahashi, M. Fukuhara, A. Inoue and Y. Kawazoe

8. *Ab-Initio* Molecular Dynamics Study on Crystal Structure of Beta-Dicalcium Silicate..... 515
 33rd Conference on OUR WORLD in CONCRETE & STRUCTURES
 Singapore (2008.8.25-27) pp.415-420
 R. Sakurada, A. K. Singh, B. Yakobson, M. Uzawa and Y. Kawazoe

9. Theoretical Study on Phase Stability, Magnetism and Spin-Induced Transport in CeMnNi_4 521
 Summer School “Nanomagnetism and Spintronics”
 Prague, Czech Republic (2008.9.5-13)
 M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe
10. On the Effect of Excess Electrons in Hexagonal Close-Packed Mg and Model Clusters 522
 Eighth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2008)
 Sydney, Australia (2008.9.14-19) No.PP062 (Poster)
 Masae Takahashi, Mikio Fukuhara, Akihisa Inoue and Yoshiyuki Kawazoe
11. Infrared Photodissociation of Molecule-Adsorbed Cobalt Cluster Ions—Optical Absorption by Vibrational and Electronic Transitions 523
 XIV International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC)
 Valladolid, Spain (2008.9.15-19)
 S. Hirabayashi, M. Ichihashi, T. Kondow
12. *Ab Initio* Study on the Quantum Dot Organic Ligand Interface: Effect of Core Structure on Cytotoxicity 524
 The 5th International Congress of Nano-Bio Clean Tech 2008
 San Francisco, USA (2008.10.27-30) No.T-C-2
 Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
13. Thermodynamics and Hydrogen Storage Ability of Mixed Hydrogen + Help Gas Clathrate Hydrate 525
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.210, No.H-04-3 (Invited)
 Vladimir Belosludov

14. Prospect for Improved Hydrogen Storage Materials 526
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.210, No.H-04-4 (Invited)
 Hiroshi Mizuseki, N. S. Venkataramanan, R. Sahara and Y. Kawazoe
15. Theoretical Study of Structural, Electronic, and Mechanical Properties in Metal
 Hydrides 527
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.211, No.H-05-4 (Oral)
 Ryoji Sahara, Bun Tuchiya, Hiroshi Mizuseki, Shinji Nagata, Tatsuo Shikama
 and Yoshiyuki Kawazoe
16. Study of Hydrogen Storage in Aluminum Hydride Coated Single Walled Carbon
 Nanotube..... 528
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.215, No.H-09-4 (Oral)
 K. Iyakutti, Y. Kawazoe, M. Rajarajeswari and V. J. Surya
17. Simulation of Water Flow Through Carbon Nanotube Using Artificial Neural
 Network 529
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.102, No.A-PA-09 (Poster)
 S. Ahadian and Y. Kawazoe
18. Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphene Producing Star-Like STM Images..... 530
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.220, No.H-PH-14 (Poster)
 Mohammad Khazaei, Mohammad S. Bahramy, Ahmad Ranjbar,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

19. Structural Optimization by TOMBO: Case Study of Hydrides and Molecules..... 531
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.221, No.H-PH-18 (Poster)
 Ryoji Sahara, Osamu Kikegawa, Saeed Bahramy, Ryunosuke Note,
 Hiroshi Mizuseki, Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
20. Hydrogen Storage in BH₃ and NH₃ Functionalized (5, 5) SWCNT 532
 AsiaNANO 2008 — The 2008 Asian Conference on Nanoscience and
 Nanotechnology —
 Biopolis, Singapore (2008.11.3-6) p.222, No.H-PH-21 (Poster)
 V. J. Surya, K. Iyakutti, Y. Kawazoe and M. Rajarajeswari
21. Theoretical Study on Transport Properties of One-Dimension Nanosystems 533
 8th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME 2008)
 Kobe, Japan (2008.12.16-18) pp.66-67, No.SII-7 (Oral)
 R. V. Belosludov, S. U. Lee, H. Mizuseki, T. Takenobu, Y. Iwasa and
 Y. Kawazoe
- <2009 年>
1. Hydrogen Adsorption over Lithium-Functionalized Calix[4]Arenes 535
 International Conference on Hydrogen and Hydrogen Storage: Methods and
 Materials
 Bangalore, India (2009.1.3-6) p.138, No.P-64 (Poster)
 N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
2. Theoretical Prediction of Clean Nanoscale Materials Saving Energy 536
 International Conference on Active/Smart Materials
 Madurai, India (2009.1.7-9) p.24, No.PL-2 (Plenary)
 Yoshiyuki Kawazoe
3. Investigation of Functionalized Nanostructured Carbon Materials as Possible
 Hydrogen Storage Medium 537
 International Conference on Active/Smart Materials
 Madurai, India (2009.1.7-9) p.31, No.IT-5 (Invited)
 K. Iyakutti, V. J. Surya, M. Rajarajeswari and Y. Kawazoe

4. Nucleic Acid Base-Uracil Adsorption on Single Walled Carbon Nanotube..... 538
International Conference on Active/Smart Materials
Madurai, India (2009.1.7-9) p.129, No.SMART142 (Oral)
M. Rajarajeswari, K. Iyakutti and Y. Kawazoe

5. Molecular Hydrogen Storage in SWCNT Functionalized with Nickel Hydride 539
International Conference on Active/Smart Materials
Madurai, India (2009.1.7-9) p.132, No.SMART146 (Oral)
V. J. Surya, K. Iyakutti, N. S. Venkataramanan and Y. Kawazoe

6. Theoretical Study of Ligand Coated Core/Shell Quantum Dots: Effect of Core Structure on Cyclotoxicity 540
2nd International Symposium on Nanomedicine (ISNM2009) &
Asian Core Symposium – Nano and Biomedical Molecular Science –
Okazaki, Japan (2009.2.4-7) p.61, No.P-13 (Poster)
Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and
Yoshiyuki Kawazoe

7. Designing Nanogadget for Nanoelectronic Device by Carbon Nanotubes 541
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Inv-5
Sang Uck Lee, Mohammad Khazaei, Fabio Pichierri, Rodion V. Belosludov,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

8. Highly Stable and Symmetric Boron Caged B@Co₁₂@B₈₀ Core-Shell Cluster 542
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Inv-7
Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, E. G. Wang, Ding-Sheng Wang,
H. Mizuseki and Y. Kawazoe

9. First-Principles Design of Nanostructures for Hydrogen Storage 543
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Inv-9
 G. P. Das
10. Anatomy of Nano Sized Hexagonal Graphene Molecules 544
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Inv-11
 Michael R Philpott and Yoshiyuki Kawazoe
11. Electronic and Geometric Structures of Single Platinum Clusters on Silicon(111)
 Surface 545
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Oral-7
 H. Yasumatsu, T. Hayakawa, P. Murugan, Y. Kawazoe and T. Kondow
12. Magnetic Control of Carbon Materials by Carrier Doping 546
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Oral-9
 M. Saito, K. Sawada, F. Ishii, S. Okada and T. Kawai
13. Birefringence of β -BaB₂O₄ Crystal in the Terahertz Region for Parametric Device
 Design 547
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Oral-11
 Elmer Estacio, Shigeki Saito, Tomoharu Nakazato, Yusuke Furukawa,
 Nobuhiko Sarukura, Marilou Cadata, Minh Hong Pham, Carlito Ponceca, Jr.,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

14. Metropolis-Hastings Algorithm for Sampling and Analyzing the Consensus Secondary Structures of Aligned Nucleic Acid Molecules..... 548
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.Oral-17
 Akito Taneda
15. Maximum Hydrogen Storage Capacity on Rh₈ Cubic Cluster..... 549
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-2
 Y. C. Bae, V. Kumar and Y. Kawazoe
16. Theoretical Study of Structure Phase Transition in Kr and Ar Clathrate Hydrates Under Pressure..... 550
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-12
 Oleg S. Subbotin, Vladimir R. Belosludov, Tatiana Adamova, Rodion V. Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe and Jun-ichi Kudoh
17. Molecular Adsorption of H₂ on Nickel Clusters..... 551
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-13
 Venkataramanan, N. S., Kumar, V., Sahara, R., Mizuseki, H. and Kawazoe, Y
18. Theoretical Insights into the Formation, Structure, and Energetics of Anticancer Oxaliplatin Drug and Cucurbit[*n*]urils *n* = 5 to 8 552
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-14
 Suvitha, A., Venkataramanan N. S., Belosludov, R. V., Mizuseki, H., Kawazoe, Y and N. Ohuchi

19. Evaluation of the Cox Equation to Derive Dynamic Contact Angle at Nanopores Imbibition: A Molecular Dynamics Study..... 553
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-16
S. Ahadian and Y. Kawazoe
20. Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation for Proton Hopping in Nafion Structure..... 554
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-17
M. Souissi, A. Miyamoto and Y. Kawazoe
21. Crystal Structure of Beta Form-Belite Substituted with Trace Impurities 555
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-19
Ryoji Sakurada, Abhishek Kumar Singh, Masami Uzawa and Yoshiyuki Kawazoe
22. Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium 556
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-20
G. Chen and Y. Kawazoe
23. Theoretical Study of Hydrogen Clathrate: Role of Guest-Guest and Guest-Host Interactions on Stability of Water Framework..... 557
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-21
R. V. Belosludov, H. Mizuseki, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov and Y. Kawazoe

24. Effect of Doping on Magnetic Properties of Graphene Nanoribbons 558
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-25
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and
 Yoshiyuki Kawazoe
25. Band Structure and Thermoelectric Properties of Type-I and Type-VIII Ba₈Ga₁₆Sn₃₀
 Clathrates 559
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-28
 Y. Kono, N. Ohya, T. Taguchi, K. Suekuni, M. A. Avila, T. Takabatake and
 K. Akai
26. Thermoelectric Properties of CoSb₃ Compounds in the High Temperature Region 560
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-30
 H. Takagi, K. Koga, K. Akai and M. Matsuura
27. Guest-Order Tuning in Dual-Guest Semiconducting Clathrates 561
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-31
 M. Kakida, K. Akai, K. Kishimoto, T. Koyanagi, H. Takagi and M. Matsuura
28. Geometrical Indications of Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphite Producing Star
 and Ellipsoidal Like Features in STM Images 562
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-32
 Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy,
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

29. *N* Dependent Stability of Na_N Clusters..... 563
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-34
 Masahiro Itoh, Vijay Kumar, Tadafumi Adschri and Yoshiyuki Kawazoe
30. Hund's Spin-Multiplicity Rule for the Excited States of He and Be Atoms 564
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-35
 Takayuki Oyamada, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
31. Phonon Modes of DNA Based on First-Principles Calculation 565
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-37
 Shigeki Saito, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
32. First-Principles Calculations of Hyperfine Structure in *M* Doped $\text{Si}_{16}\text{H}_{16}$ Fullerene
 Cages: *M* = Cr, Mn, and Fe..... 566
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-38
 Mohammad Saeed Bahramy, Vijay Kumar and Yoshiyuki Kawazoe
33. The Kinetics of Li Atom in LiBH_4 567
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-39
 Qi Peng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
34. Atomistic Evaluation of the Grain Boundary in Silicon: Pair Distribution Function.... 568
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
 Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-40
 Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe

35. Controlling the Percolation Behavior of Conductor-Insulator Composites by Changing the Granular Size of Insulators 569
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-41
 Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
36. Structural Stability, Magnetism and Hyperfine Interactions of Hydrogen Monomer, Dimers, Trimers and Tetramers on Graphene..... 570
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-42
 Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy, Mohammad Khazaei, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
37. Theoretical Study on Hydrogen Storage Materials by All-Electron Mixed-Basis Program TOMBO 571
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-43
 Osamu Kikegawa, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
38. Reducibility of Tin-Doped Indium Oxide 572
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-44
 T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
39. Hydrogen Storage on Li Functionalized MOF's and Organic Hosts 573
 The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization)
 Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-45
 Venkataramanan, N. S., Sahara, R., Mizuseki, H. and Kawazoe, Y

40. Atomic Structures and Properties of Boron Nitride Nanomaterials..... 574
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18) No.PS-47
Takeo Oku, Naruhiro Koi, Katsuaki Suganuma, Rodion V. Belosludov and
Yoshiyuki Kawazoe
41. Theoretical Study of Quantum Dot/Organic Ligand Interface for Application in
Early Cancer Detection..... 575
6th International Conference on Biomedical Applications of Nanotechnology
(6th nano med)
Berlin, Germany (2009.3.4-6) pp.32-33 (Oral)
Rodion Belosludov, Hiroshi Mizuseki, Atsuo Kasuya and Yoshiyuki Kawazoe
42. Clusters, Platelets, and Nanowires of Mo-S, and Their Assemblies 577
2009 APS March Meeting
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.A26.00011 (Oral)
P. Murugan, Vijay Kumar, Y. Kawazoe and N. Ota
43. Interaction of Water and Methanol with Graphene, C60 and (10,10) Nanotube..... 578
2009 APS March Meeting
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.J24.00007 (Oral)
Vijay Kumar, M. Amar, J. F. Maguire and Y. Kawazoe
44. Theoretical Study of Hydrogen Storage in Ca-Coated Fullerenes 579
2009 APS March Meeting
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.Q28.00007 (Oral)
Qiang Sun, Qian Wang, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena
45. Mg-Doped GaN Nanostructures: Energetics, Magnetism and H₂ Adsorption 580
2009 APS March Meeting
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.Q28.00010 (Oral)
Qian Wang, Qiang Sun and Puru Jena

46. First-Principles Study of the Effect of Vacancies on Magnetic Properties..... 581
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.V22.00002 (Oral)
 Yoshiyuki Kawazoe, Qian Wang, Qiang Sun and Puru Jena
47. Atomic Structure of PdNiP Bulk Metallic Glass from *Ab Initio* Simulations..... 582
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.X36.00002 (Oral)
 Vijay Kumar, T. Fujita, M. W. Chen, A. Inoue and Y. Kawazoe
48. Effect of Excess Electrons on Hexagonal Close-Packed Mg and the Model Clusters
 for Bulk Metallic Glasses..... 583
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.X36.00005 (Oral)
 Masae Takahashi, Mikio Fukuhara, Akihisa Inoue and Yoshiyuki Kawazoe
49. Controlling the Percolation Behavior of Conductor-Insulator Composites by
 Changing the Granular Size of Insulators 584
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.C1.00133 (Poster)
 Kazuhito Shida, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
50. Transport Properties of Nanoscale Materials by First-Principles Calculations..... 585
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.K1.00175 (Poster)
 Hiroshi Mizuseki, Rodion V. Belosludov, S.-U. Lee and Yoshiyuki Kawazoe
51. Atomistic Modeling of the Grain Boundary in Silicon..... 586
 2009 APS March Meeting
 Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.K1.00198 (Poster)
 Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara and Yoshiyuki Kawazoe

52. Electronic Structure of Aromatic and Quinoidic Oligothiophenes by First-Principles Calculations 587
2009 APS March Meeting
Pittsburgh, Pennsylvania, USA (2009.3.16-20) No.S1.00027 (Poster)
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
53. Electron-Doped Silicon π -Electron Systems with Classical Forms 588
Frontiers in Condensed Matter Physics & Nanoscience – A Symposium in
Honor of the 60th Birthday of Steven G. Louie –
Berkeley, USA (2009.3.21-22)
Masae Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe

IV. 紀要

<2008年>

1. 微小超伝導複合体と超伝導ネットワークの数値シミュレーション 589
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.29-34
加藤 勝, 末松久孝, 中島 督, 小山富男, 海老澤丕道, 林 正彦,
町田正彦, 佐藤 修
2. 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 595
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.35-39
村瀬 暁, 延原正彦, 金 錫範, 七戸 希, 淡路 智, 小黒英俊,
西島 元, 渡辺和雄, 和気正芳
3. 第一原理計算によるナノテクノロジー研究 600
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.74-79
大野かおる, 石井 聡, 飯高敏晃, 重田育照, Pichierri, Fabio.,
川添良幸, 水関博志, 佐原亮二, Belosludov, R. V.
4. 凝縮系中のナノ構造微細制御による機能発現 606
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.89-90
赤井光治, 仙田康浩, 嶋村修二, 高木英俊, 古賀健治, 松浦 満
5. 第一原理分子動力学法によるビーライト (C₂S) の結晶構造解析 608
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.109-110
桜田良治, Abhishek Kumar Singh, 鶴沢正美, 川添良幸
6. 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 610
平成19年度 東北大学金属材料研究所
研究部共同研究報告 (2008.6) pp.119-120
近藤 保, 寺寄 亨, 市橋正彦, 安松久登, 川添良幸, P. Murugan

7. B-C-N 系ナノ物質の原子配列と物性に関する研究…………… 612
 平成 19 年度 東北大学金属材料研究所
 研究部共同研究報告 (2008.6) p.160
 奥 健夫, 小井成弘, 菅沼克昭, 川添良幸, Rodion V. Belosludov
8. 第一原理ポテンシャル繰り込み法による金属の弾性特性の温度依存性 …… 613
 独立行政法人 日本学術振興会 合金状態図第 172 委員会
 合金状態図第 172 委員会 研究報告書 Vol.8, No.2 (2008.10) pp.42-44
 佐原亮二, 水関博志, 大野かおる, 川添良幸

<2009 年>

1. 異機種計算機統合による材料設計専用スーパーコンピューティングシステム…………… 616
 東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.51-57
 一関京子, 三浦重幸, 野手竜之介, 佐藤和弘, 五十嵐伸昭, 水関博志,
 佐原亮二, 石川真二, 松本秀一, 川添良幸
2. NAREGI ミドルウェアを利用した超大規模材料設計シミュレーション計算
 環境の構築…………… 623
 東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.59-65
 一関京子, 五十嵐伸昭, 佐原亮二, 橋 祐一, 鈴木嘉文, 川添良幸
3. 不正アクセス検知サーバの構築とグローバルネットワーク上の不正アクセ
 ス現状調査…………… 630
 東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.67-72
 三浦重幸, 川添良幸
4. スーパーコンピューティングシステムネットワークの SSL-VPN リモートア
 クセスシステム…………… 636
 東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.73-76
 三浦重幸, 佐藤和弘, 川添良幸, 山口 裕, 永島裕之, 池上忠嗣
5. スーパーコンピューティングシステム用アプリケーションプログラムの導
 入と運用…………… 640
 東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.77-80
 五十嵐伸昭, 一関京子, 三浦重幸, 野手竜之介, 佐藤和弘, 川添良幸

6. LSF におけるネットワークライセンスアプリケーションプログラム ATK の
実行環境改善 644
東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.81-84
五十嵐伸昭, 一関京子, 野手竜之介, 山口 裕, 川添良幸

7. 携帯電話によるスーパーコンピューティングシステムのジョブ状況確認機
能の開発 648
東北大学金属材料研究所 技術研究報告 第 23 号 (2009.3) pp.85-88
五十嵐伸昭, 一関京子, 佐藤和弘, 松本秀一, 鈴木嘉文, 日向本子,
川添良幸

V. 予稿集

<2008年>

1. 分子付着コバルトクラスターイオンの赤外光解離分光—振動および電子遷移による光吸収 653
日本物理学会 第 63 回年次大会
近畿大学 (2008.3.22-26) No.26aRA-7
平林慎一, 市橋正彦, 近藤 保
2. 分子吸着コバルトクラスターイオンの光解離スペクトル—近赤外および中間赤外領域— 654
日本化学会 第 88 春季年会
立教大学 (2008.3.26-30) No.4D2-02
平林慎一, 市橋正彦, 近藤 保
3. Molecular-Dynamics Simulation and Characterization of Tilt and Twist Grain Boundaries 655
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.320, No.361
J. B. Yang, Y. Nagai, T. Toyama, Yu. N. Osetsky and M. Hasegawa
4. 不均質な形状の粒子を有するサイトパーコレーションの臨界現象 656
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.59, No.S2-05 (一般講演, Oral)
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
5. First Principles Calculation Study on Catalytic Reaction for Fuel Cells 657
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.60, No.S2-06 (一般講演, Oral)
Susumu Imai, Palanichamy Murugan, Vijay Kumar, Norio Ota and Yoshiyuki Kawazoe
6. Electronic and Optical Properties of the Al₂O₃ doped SiO₂ 658
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.96, No.S6-02 (一般講演, Oral)
Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe

7. ビリアル定理に基づくフロント第一、第二則の理論的解釈…………… 659
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.130, No.PS1-020 (Poster)
 小山田隆行, 本郷研太, 川添良幸, 安原 洋
8. First-Principles Calculations of Many-Body States for the Single Nitrogen-Vacancy Defect in Diamond…………… 660
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.131, No.PS1-021 (Poster)
 A. Ranjbar, M. Heidari Saani, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
9. Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation for Proton Hopping in Nafion Structure…………… 661
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.132, No.PS1-022 (Poster)
 M. Souissi, B. Kim, T. Hattori, A. Miyamoto and Y. Kawazoe
10. Is it Feasible to Employ Artificial Neural Network (ANN) Approach to Analyze Fluid Flow in Nanochannels?…………… 662
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.133, No.PS1-023 (Poster)
 Samad Ahadian and Yoshiyuki Kawazoe
11. The Role of Aromaticity and the π -Conjugated Framework in Multiporphyrinic Systems as Single-Molecule Switches…………… 663
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.135, No.PS1-025 (Poster)
 Sang Uck Lee, Rodion V. Belosludov, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
12. Electronic and Structural Properties of CdSe-Based Quantum Dots Capping by Organic Ligands…………… 664
 ナノ学会第6回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.146, No.PS1-036 (Poster)
 R. V. Belosludov, H. Mizuseki, A. Kasuya and Y. Kawazoe

13. Electronic and Optical Properties of the Al₂O₃ doped SiO₂..... 665
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.150, No.PS1-040 (Poster)
Yong Yang, Masae Takahashi, Hiroshi Abe and Yoshiyuki Kawazoe
14. パラメトリック型デバイス設計に向けた BBO 結晶の THz 複屈折測定..... 666
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.160, No.PS1-050 (Poster)
斎藤繁喜, エルマー・エスタシオ, 中里智治, 古川裕介, 猿倉信彦,
マリル・カダタル, ミン・パム, カルリト・ポンセカ, 水関博志,
川添良幸
15. feram コードによる BaTiO₃ 強誘電体薄膜キャパシターのヒステリシス・ループの分子動力学計算..... 667
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.161, No.PS1-051 (Poster)
西松 毅, 川添良幸
16. ペロブスカイト型 RPd₃B (R= 希土類元素)のアーク熔融法による合成および評価..... 668
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.178, No.PS1-068 (Poster)
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
17. 酸化インジウムと二酸化スズの電子状態に対する酸素および空孔の影響 669
ナノ学会第 6 回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.179, No.PS1-069 (Poster)
T. M. Inerbaev, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸, 中村 崇

18. STM Images of Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphene 670
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.184, No.PS1-074 (Poster)
Mohammad Khazaei, Mohammad S. Bahramy, Ahmad Ranjbar,
Samad Ahadian, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
19. Phase Diagram Description of Hydrogen Clathrate Hydrate: Theoretical Aspects of
Energy Storage Application 671
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.185, No.PS1-075 (Poster)
R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov and
Y. Kawazoe
20. 赤外領域での分子吸着-金属クラスターイオンの光吸収 672
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.188, No.PS1-078 (Poster)
平林慎一, 市橋正彦, 近藤 保
21. First-Principles Study on Spin-Dependent Transport, Phase Stability and
Magnetism in CeMnNi₄ 673
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.192, No.PS1-082 (Poster)
M. S. Bahramy, P. Murugan, G. P. Das and Y. Kawazoe
22. Quantum Conductance of 1D Carbon Systems at Finite Temperature: Carbon Chain
and Carbon Nanotube 674
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.193, No.PS1-083 (Poster)
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
23. Hydrogen Absorption over Titanium-Doped Nickel Clusters 675
ナノ学会第6回大会
九州大学 (2008.5.7-9) p.194, No.PS1-084 (Poster)
N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe

24. 密度汎関数理論に基づく ${}^7\text{Be}@C_{60}$ における電子捕獲崩壊速度とその温度依存性の第一原理計算..... 676
 ナノ学会第 6 回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.282, No.PS2-084 (Poster)
 森里嗣生, 大野かおる, 大槻 勤, スルイター マーセル, 川添良幸
25. 固体表面に担持されたサイズ選別金属クラスターの幾何構造と電子構造
 ナノ学会第 6 回大会..... 677
 九州大学 (2008.5.7-9) p.284, No.PS2-086 (Poster)
 安松久登, 早川鉄一郎, 冬木正紀, Palanichamy Murugan, 川添良幸,
 近藤 保
26. 第一原理計算による Ti, Zr, Hf 水素化物の弾性特性 678
 ナノ学会第 6 回大会
 九州大学 (2008.5.7-9) p.286, No.PS2-088 (Poster)
 佐原亮二, 土屋 文, 水関博志, 永田晋二, 四竈樹男, 川添良幸
27. 物質安定性及び磁性の本質的解明 679
 第 115 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2008.5.13-14) (Oral)
 川添良幸
28. feram コードによる BaTiO_3 強誘電体薄膜キャパシターのヒステリシス・ループの分子動力学計算..... 680
 第 115 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2008.5.13-14) p.31 (Poster)
 西松 毅, 川添良幸
29. Hcp-Mg およびモデルクラスターに及ぼす余剰電子の効果 681
 第 115 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年春季)
 東北大学金属材料研究所 (2008.5.13-14) p.33 (Poster)
 高橋まさえ, 福原幹夫, 井上明久, 川添良幸

30. 粒径分布のあるサイトパーコレーションモデルにみる相転移の臨界現象 …… 682
 合金状態図第 172 委員会 第 14 回委員会, 第 15 回研究会
 茨城 (2008.5.16-17) pp.36-40
 佐原亮二, 志田和人, 水関博志, 蟹江澄志, 大野かおる, 村松淳司,
 川添良幸
31. 「NAREGI ミドルウェアを利用した超大規模材料設計シミュレーション計
 算環境の最先端学術情報基盤への構築」及び「アジア材料設計シミュレーシ
 ョン VO (ACCMS-VO) 形成」 …… 687
 国立情報学研究所 平成 19 年度 CSI 委託事業報告交流会
 (ネットワーク・e-Science 系)
 学術総合センター中会議場 (2008.6.11) pp.2-6
 川添良幸
32. シリコンバルク多結晶におけるせん断応力と多結晶組織との関係 …… 692
 日本学術振興会 産学協力研究委員会 次世代の太陽光発電システム
 第 175 委員会 平成 20 年度 第 5 回「次世代の太陽光発電システム」
 シンポジウム
 宮崎 (2008.6.26-27) No.P-1 (Poster)
 高橋 勲, 宇佐美徳隆, 横山竜介, 沓掛健太郎, 森下浩平, 藤原航三,
 中嶋一雄
33. 第二, 第三周期原子系列の電子構造に対する相関の影響 …… 695
 日本物理学会 2008 年秋季大会
 岩手大学 (2008.9.20-23) p.201, No.20pVC-1
 小山田隆行, 川添良幸, 安原 洋
34. 不均質な形状の粒子を含むパーコレーションモデルの普遍性解析 …… 696
 日本金属学会 2008 年秋期 (第 143 回) 大会
 熊本大学 (2008.9.23-25) p.249, No.312
 佐原亮二, 水関博志, 志田和人, 蟹江澄志, 大野かおる, 村松淳司,
 川添良幸

35. Molecular Static Simulation of the Sliding Behavior of Twist Grain Boundary {110} in Iron.....
- 日本金属学会 2008 年秋期 (第 143 回) 大会
 熊本大学 (2008.9.23-25) p.325, No.544
 J. B. Yang, Y. Nagai, T. Toyama, Yu. N. Osetsky and M. Hasegawa
36. *Ab Initio* Study on Improving the Hydrogen Absorption of MOFs
- 日本金属学会 2008 年秋期 (第 143 回) 大会
 熊本大学 (2008.9.23-25) p.434, No.872
 N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
37. 半導体中の点欠陥の第一原理計算..... 698
- 2008 年度 格子欠陥フォーラムー「欠陥研究、その明日への挑戦」ー
 東北大学金属材料研究所 (2008.9.24) p.25
 西松 毅
38. 赤外領域での分子吸着金属クラスターの電子遷移..... 699
- 第 2 回分子科学討論会
 福岡 (2008.9.24-27) No.3B06 (Oral)
 平林慎一, 市橋正彦, 近藤 保
39. 第一原理計算による省 InITO 組成探索..... 701
- 資源・素材 2008 (仙台)
 仙台 (2008.10.7-9) pp.101-102, No.D11-2
 川添良幸, 水関博志, 佐原亮二
40. 3次元非定常融液対流を考慮した酸化物 CZ 炉総合熱解析ー時空間平均
 化法の検討..... 703
- 第 38 回 結晶成長国内会議 (NCCG-38)
 仙台 (2008.11.4-6) p.132, No.06aB02 (Oral)
 塚田隆夫, 杉岡健一, 小林正樹, 敬 成君

41. 補強材の配置の異なる Nb₃Sn 超電導線の 3 次元歪解析 704
第 79 回 2008 年度秋季低温工学・超電導学会
高知 (2008.11.12-14) p.77 (Poster)
延原正彦, 岡田一星, 村瀬 暁, 七戸 希, 淡路 智, 小黒英俊,
西島 元, 渡辺和雄, 和気正芳
42. メタル置換直線型ジシリルン..... 705
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.4 (Poster)
高橋まさえ, 川添良幸
43. Influence of Dynamic Contact Angle on the Capillary Rise at Nanoscale Using
Molecular Dynamics Simulation..... 706
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.35 (Poster)
S. Ahadian and Y. Kawazoe
44. feram コードとスーパーコンピュータを用いた強誘電体薄膜キャパシタのヒ
ステリシス・ループの超高速分子動力学シミュレーション..... 707
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.37 (Poster)
岩本昌也, 西松 毅, 川添良幸
45. Hydrogen Storage on BN Materials 708
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.48 (Poster)
N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
46. First-Principles Calculations of Many-Body States for the Single Nitrogen- Vacancy
Defect in Diamond..... 709
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.61 (Poster)
A. Ranjbar, M. Heidari Saani, K. Esfarjani and Y. Kawazoe

47. ACCMS-VO ホスティングパッケージの開発 710
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.66 (Poster)
一関京子, 五十嵐伸昭, 橋 祐一, 川添良幸
48. 非電導粒子の直径変化によるパーコレーション閾値の制御 711
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.72 (Poster)
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
49. Band Gap Engineering in Doped Graphene Nanoribbons 712
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.93 (Poster)
Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani
and Yoshiyuki Kawazoe
50. Geometrical Indications of Adsorbed Hydrogen Atoms on Graphite Producing
Starlike and Ellipsoidal Features in STM Images 713
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.99 (Poster)
Mohammad Khazaei, Ahmad Ranjbar, Mohammad Saeed Bahramy,
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
51. Interaction of Gas Molecules with Ti-benzene Complexes 714
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.100 (Poster)
G. Chen, P. Jena and Y. Kawazoe
52. 全電子混合基底法による平面波数の削減 715
第 116 回 東北大学金属材料研究所講演会 (2008 年秋季)
東北大学金属材料研究所 (2008.11.27-28) p.103 (Poster)
亀卦川理, 佐原亮二, 水関博志, 大野かおる, Marcel Sluiter, 川添良幸

53. An Efficient Tool to Analyze Fluid Flow in Nanopores 716
 KINKEN-WAKATE 2008
 Akiu-spa, Sendai (2008.12.4-5) p.23 (Poster)
 S. Ahadian and Y. Kawazoe
54. Hydrogen Storage on Organic Hosts 717
 KINKEN-WAKATE 2008
 Akiu-spa, Sendai (2008.12.4-5) p.30 (Poster)
 N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
55. The Growth Behavior of Metal-Encapsulated Silicon Nanoclusters and Nanotubes 718
 KINKEN-WAKATE 2008
 Akiu-spa, Sendai (2008.12.4-5) p.65 (Poster)
 Qi Peng, Jiang Shen and Yoshiyuki Kawazoe
56. Band Gap Engineering in Doped Graphene Nanoribbons 719
 KINKEN-WAKATE 2008
 Akiu-spa, Sendai (2008.12.4-5) p.66 (Poster)
 Narjes Gorjizadeh, Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and
 Yoshiyuki Kawazoe
57. Hydrogen Storage on Organic Hosts 720
 Computational Science Workshop 2008 – Frontiers towards Predictive
 Simulations and Computations –
 Tsukuba, Japan (2008.12.8-10) p.54, No.P22 (Poster)
 N. S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
58. Theoretical Study of Thermodynamics Properties of Hydrogen Clathrate Hydrate 721
 Computational Science Workshop 2008 – Frontiers towards Predictive
 Simulations and Computations –
 Tsukuba, Japan (2008.12.8-10) p.61, No.P29 (Poster)
 Rodion V. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Hiroshi Mizuseki,
 Vladimir R. Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe

59. Hydrogen Storage on Lithium-Functionalized Calix[4]arenes 722
文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
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
「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) (Oral)
N.S. Venkataramanan, R. Sahara, H. Mizuseki and Y. Kawazoe
60. Unified Interpretation of Hund's First and Second Rules and the Analysis of
Correlation in Consistency with the Virial Theorem 723
文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
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
「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.9 (Poster)
Takayuki Oyamada, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara
61. Reduction of the Number of Planewaves by All-Electron Mixed-Basis Approach..... 724
文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
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
「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.10 (Poster)
Osamu Kikegawa, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno,
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
62. First-Principles Calculations of Many-Body States for the Single Nitrogen- Vacancy
Defect in Diamond..... 725
文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
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
「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.11 (Poster)
A. Ranjbar, M. Heidari Saani, K. Esfarjani and Y. Kawazoe

63. Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation for Proton Hopping in Nafion Structure..... 726
 文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 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
 「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
 東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.12 (Poster)
 M. Souissi, A. Miyamoto and Y. Kawazoe
64. Evaluation of the Cox Equation to Derive Dynamic Contact Angle at Nanopores Imbibition: A Molecular Dynamics Study..... 727
 文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 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
 「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
 東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.13 (Poster)
 S. Ahadian and Y. Kawazoe
65. Theoretical Search for the Potential Hydrogen Storage Medium 728
 文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 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
 「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
 東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.14 (Poster)
 G. Chen and Y. Kawazoe
66. The Growth Behavior of Metal-Encapsulated Silicon Nanoclusters and Nanotubes.... 729
 文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 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
 「次世代ナノ情報機能・材料」グループ成果報告会
 東北大学金属材料研究所 (2008.12.10-11) No.15 (Poster)
 Qi Peng, Jiang Shen and Yoshiyuki Kawazoe
67. Si バルク多結晶における粒界の方位関係とせん断応力との関係..... 730
 結晶工学分科会 2008 年 年末講演会
 東京 (2008.12.11) No.2 (Poster)
 高橋 勲, 宇佐美德隆, 横山竜介, 沓掛健太朗, 藤原航三, 森下浩平,
 中嶋一雄

<2009年>

1. 第一原理計算によるリチウムを付加したカリックスアレーンの水素貯蔵研究..... 731
神戸大学自然科学系先端融合研究環 ナノエンジニアリング
重点研究チームーナノ学会「ナノ構造・物性」部会
「ナノ構造・物性」第一回研究会
神戸大学 (2008.1.23-24) p.10, No.G-1
Natarajan Sathiyamoorthy Venkataramanan, 佐原亮二, 水関博志,
川添良幸
2. 非電導粒子の直径変化によるパーコレーション閾値の制御..... 732
神戸大学自然科学系先端融合研究環 ナノエンジニアリング
重点研究チームーナノ学会「ナノ構造・物性」部会
「ナノ構造・物性」第一回研究会
神戸大学 (2008.1.23-24) p.14, No.G-5
志田和人, 佐原亮二, 水関博志, 川添良幸
3. Quality Assurance of the First Principles Calculation 733
Supercomputing in Solid State Physics 2009 (SciSSP2009)
University of Tokyo, Japan (2009.2.16-19) p.58 (Oral)
Yoshiyuki Kawazoe, Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yohei Maruyama and
Hiroshi Yasuhara
4. The Small Pt Catalyst Particle Supported on Carbon Nanotube..... 734
GRI Symposium II on Cluster Science: Reactivity of Clusters
Nagoya, Japan (2009.2.24-26) p.57, No.P-7 (Poster)
G. Chen and Y. Kawazoe
5. First-Principles Simulations about FeAs-Based $\text{REFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ (RE= La, Sm)
Superconductors: Vibrational and Electronic Properties 735
2009 WPI-AIMR Annual Workshop
宮城蔵王 (2009.3.1-3.6) p.79, No.MW-45 (Oral)
Pengfei Guan, Ling Zhang and Mingwei Chen

6. Doping and Temperature Dependence of Raman Scattering in FeAs-Based REFeAsO_{1-x}F_x (RE= Nd, Sm) Superconductors..... 736
 2009 WPI-AIMR Annual Workshop
 宮城蔵王 (2009.3.1-3.6) p.83, No.MW-49 (Oral)
 L. Zhang, T. Fujita, F. Chen, D. L. Feng, S. Maekawa and M. W. Chen
7. Spin and Band Gap Engineering in Doped Graphene Nanoribbons 737
 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
 東北大学金属材料研究所 (2009.3.9) p.11 (Oral)
 Narjes Gorjizadeh, Amir Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
8. An Efficient Tool to Analyze Fluid Flow in Nanopores 738
 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
 東北大学金属材料研究所 (2009.3.9) p.58, No.P40 (Poster)
 Samad Ahadian and Yoshiyuki Kawazoe
9. The Kinetics of Li Atom in LiBH₄ 739
 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
 東北大学金属材料研究所 (2009.3.9) p.85, No.P67 (Poster)
 Qi Peng, Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
10. テラヘルツ波発振をもたらす固有ジョセフソン接合内の電磁場 740
 日本物理学会 第 64 回年次大会
 立教大学 (2009.3.27-30) No.28pTC-4 (Invited)
 小山富男
11. Differential Capacitance of the Electric Double Layer in Ionic Liquids: Influence of Potential, Ion Size, and Temperature..... 742
 日本物理学会 第 64 回年次大会
 立教大学 (2009.3.27-30) p.641, No.29pYG-1
 袁 洪涛, 下谷秀和, H. Aliah, 岩佐義宏

12. 第一原理計算による新水素吸蔵材料の提案 743
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.72, No.S1.12 (基調講演)
川添良幸, 水関博志, 佐原亮二, Rodion Belosludov
13. Hydrogen Storage on MOFs and Organic Hosts 743
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.73, No.S1.13
N. S. Venkataramanan, H. Mizuseki, R. Sahara and Y. Kawazoe
14. Theoretical Study of Hydrogen Clathrate Hydrate as Hydrogen Storage Material 744
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.73, No.S1.14
R. V. Belosludov, 水関博志, 川添良幸, O. S. Subbotin, V. R. Belosludov
15. クローン多体系摂動計算の誤りを正す精密第一原理計算 744
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.151, No.S5.1 (基調講演)
川添良幸, 小山田隆行, 丸山洋平, 安原 洋
16. Reducibility of Tin-Doped Indium Oxide 745
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.153, No.S5.6
T. M. Inerbaev, R. Sahara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and T. Nakamura
17. FEMTECK を用いた LiBH_4 における高 Li イオン伝導機構の解明 745
日本金属学会 2009 年春期 (第 144 回) 大会
東京工業大学 (2009.3.28-30) p.155, No.S5.9
池庄司民夫, 土田英二, 川添良幸, 松尾元彰, 李 海文, 折茂慎一
18. 第一原理ポテンシャルを基にした DNA のフォノンモード 746
第 56 回 応用物理学関係連合講演会
筑波大学 (2009.3.30-4.2) No.31a-F-7 (Poster)
斎藤繁喜, 水関博志, 川添良幸

VI. 新聞記事

<2008年>

1. ナノ学会 5月7～9日に第6回大会を九州大で開催ーニューフロンティア研究に注目ー 747
半導体産業新聞 (2008.4.23)
2. 三角ドリルの原理ー秋山仁のこんなところにも数学が！ー 748
産経新聞 (2008.8.5)

<2009年>

1. 第三の炭素結晶 証明ー東北大グループ 工業向け 合成着手ー 749
河北新報 (2009.2.10)
2. 炭素新物質の存在予言ー東北大、合成に着手ー 750
日経産業新聞 (2009.2.12)
3. ダイヤに似た構造の新結晶ー「K4」金属結晶を確認ー東北大がスパコン計算生成法見通しも 751
日刊工業新聞 (2009.2.13)
4. 新構造の炭素物質ー合成のヒント 数学で予言ー環境エネ材料開発に期待 752
日経産業新聞 (2009.3.12)

VII. 雑誌等掲載解説記事

<2008年>

1. 『ものづくりのための「現場数学」 第13回～第18回(最終回)』 753
国際技術情報誌 M&E, (2008.4.1～2008.9.1)
川添良幸
(第1回～第12回は本書13巻に掲載)

2. 『Preface of Series by the Editor-in-Chief』 759
Advances in Materials Research Vol.11 – High-Temperature Measurements of
Materials – Springer (2008.7)
Yoshiyuki Kawazoe

3. 『Preface—Special Issue on Advances in Computational Materials Science and
Engineering V』 760
Mater. Trans., **49**[11] (2008) p.2415
Yoshiyuki Kawazoe and Masanori Kohyama

4. 『平成 20 年度東北地区国立大学法人等技術職員研修「実技コース」が開催
されました』 761
テクニカルセンターニュース, No.5 (2008.12) P.5 諸報より

5. 『常識を破る—21 世紀こそ基礎研究が世界を変える—』 762
北大・材料数理 Vol.12 April 2007 ~ March 2008 (2008.12) pp.8-9
川添良幸

<2009 年>

1. 『Preface』 764
The Third General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on
Computational Materials Science - Virtual Organization)
Sendai, Matsushima, Japan (2009.2.16-18)
Yoshiyuki Kawazoe, Tamio Ikeshoji, Hiroshi Mizuseki and Ryoji Sahara

Web 記事

<2008 年>

1. 『会長挨拶』 765
ナノ学会 (2008.5)
川添良幸

2. 『鼎談 生命科学と数理科学の間 (前編) —生命とエネルギー—』 766
東北大学 加齢医学研究所 研究最前線 インタビュー
第 33 回 (2008.5.23)

3. 『鼎談 生命科学と数理科学の間（後編）－脳とコンピューター－』 …………… 772
 東北大学 加齢医学研究所 研究最前線 インタビュー
 第 34 回 (2008.6.5)

<2009 年>

1. 『第 3 の炭素結晶を証明 東北大、回路に応用も』 …………… 780
 47NEWS (よんななニュース) (2009.2.12)
2. 『東北大、「K 4」金属結晶を確認－生成法見通しも』 …………… 781
 日刊工業新聞 (2009.2.13)

VIII. 書籍

<2008 年>

1. 『Advances in Materials Research Vol.10 – Frontiers in Materials Research –』
 Springer (2008)
 Series Editor in Chief Yoshiyuki Kawazoe
 Editors Yasunori Fujikawa, Kazuo Nakajima and Toshio Sakurai
2. 『Advances in Materials Research Vol.11 – High-Temperature Measurements of
 Materials –』
 Springer (2008)
 Series Editor in Chief Yoshiyuki Kawazoe
 Editors Hiroyuki Fukuyama and Yoshio Waseda

IX. 表彰・授与

1. 『異機種計算機統合による材料設計専用スーパーコンピューティングシステム』 …………… 783
 日立 IT ユーザ会 第 45 回大会 日立 IT 論文賞 (2008.6.3)
 「一般論文優良賞」
 一関京子, 野手竜之介, 五十嵐伸昭, 三浦重幸, 佐藤和弘

2. 『研究技術功労賞』
 社団法人 日本金属学会 (2009.3.28)
 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 797
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..... 798
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... 803
4. 東北大学金属材料研究所構内図 805
5. スーパーコンピューター棟レイアウト図 806