

Bibliography

- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] T. G. Schmalz, W. A. Seitz, D. J. Klein, and G. E. Hite, *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 1113 (1988).
- [3] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, and D. R. Huffman, *Nature* **347**, 354 (1990).
- [4] T. Guo, M. D. Diener, Y. Chai, M. J. Alford, R. E. Haufler, S. M. McClure, T. Ohno, J. H. Weaver, G. E. Scuseria, and R. E. Smalley, *Science* **257**, 1661 (1992).
- [5] R. E. Haufler, J. Conceicao, L. P. F. Chibante, Y. Chai, N. E. Byrne, S. Flanagan, M. M. Harley, S. C. O'Brien, C. Pan, Z. Xiao, W. E. Billups, M. A. Ciufolini, R. H. Hauge, J. L. Margrave, L. J. Wilson, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *J. Phys. Chem.* **94**, 8634 (1990).
- [6] S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).
- [7] N. Hamada, S. Sawada, and A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1579 (1992).
- [8] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2204 (1992).
- [9] J. W. Mintmire, B. I. Dunlap, and C. T. White, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 631 (1991).
- [10] D. H. Robertson, D. W. Brenner, and J. W. Mintmire, *Phys. Rev. B* **45**, 12592 (1992).
- [11] M. W. Treacy, T. W. Ebbesen, and J. M. Gibson, *Nature* **381**, 678 (1996).
- [12] S. Iijima, C. Brabec, A. Maiti, and J. Bernholc, *J. Chem. Phys.* **104**, 2089 (1996).
- [13] B. I. Yakobson, C. J. Brabec, and J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2511 (1996).
- [14] M. B. Nardelli, B. I. Yakobson, and J. Bernholc, *Phys. Rev. B* **57**, R4277 (1998).
- [15] M. B. Nardelli, B. I. Yakobson, and J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4656 (1998).
- [16] V. Meunier, L. Henrard, and P. Lambin, *Phys. Rev. B* **57**, 2586 (1998).
- [17] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D. T. Colbert, and R. E. Smalley, *Chem. Phys. Lett.* **243**, 49 (1995).

- [18] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y. H. Lee, S. G. Kim, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, G. E. Scuseria, D. Tománek, J. E. Fisher, and R. E. Smalley, *Science* **273**, 483 (1996).
- [19] T. W. Ebbesen, and P. W. Ajayan, *Nature* **358**, 220 (1992).
- [20] H. Dai, A. G. Rinzler, P. Nikolaev, A. Thess, D. T. Colbert, and R. E. Smalley, *Chem. Phys. Lett.* **260**, 471 (1996).
- [21] J. Kong, A. M. Cassell, and H. Dai, *Chem. Phys. Lett.* **292**, 567 (1998).
- [22] S. Iijima, T. Ichihashi, *Nature* **363**, 603 (1993).
- [23] D. S. Bethune, C. H. Kiang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, and R. Beyers, *Nature* **363**, 605 (1993).
- [24] Y. Saito, T. Yoshikawa, M. Okuda, N. Fujimoto, K. Sumiyama, K. Suzuki, A. Kasuya, and Y. Nishina, *J. Phys. Chem. Solid* **54**, 1849 (1993).
- [25] S. Seraphin, and D. Zhou, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2087 (1994).
- [26] C. Journet, W. Maser, P. Bernier, A. Loiseau, M. L. Chapelle, S. Lefrant, P. Deniard, R. Lee, and J. E. Fischer, *Nature* **388**, 756 (1997).
- [27] C. H. Kiang, W. A. Goddard III, R. Beyers, J. R. Salem, and D. S. Bethune, *J. Phys. Chem.* **98**, 6622 (1994).
- [28] A. Kasuya, Y. Sasaki, Y. Saito, K. Tohji, and Y. Nishina, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4434 (1997).
- [29] S. Bandow, S. Asaka, Y. Saito, A. M. Rao, L. Grigorian, E. Richter, and P. C. Eklund, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3779 (1998).
- [30] M. Yudasaka, R. Yamada, N. Sensui, T. Wilkins, T. Ichihashi, and S. Iijima, *J. Phys. Chem. B* **103**, 6224 (1999).
- [31] J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, and C. Dekker, *Nature* **391**, 59 (1998).
- [32] T. W. Odom, J. Huang, P. Kim, and C. M. Lieber, *Nature* **391**, 62 (1998).
- [33] W. Clauss, D. J. Bergeron, and A. T. Johnson, *Phys. Rev. B* **58**, R4266 (1998).
- [34] A. Hassanien, M. Tokumoto, Y. Kumazawa, H. Kataura, Y. Maniwa, S. Suzuki, and Y. Achiba, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3839 (1998).
- [35] H. Dai, J. H. Hafner, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, and R. E. Smalley, *Nature* **384**, 147 (1996).

- [36] S. S. Wong, E. Joselevich, A. T. Woolley, C. L. Cheung, and C. M. Lieber, *Nature* **394**, 52 (1998).
- [37] S. S. Wong, A. T. Woolley, T. W. Odom, J. L. Huang, P. Kim, D. V. Vezenov, and C. M. Lieber, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3465 (1998).
- [38] P. G. Collins, A. Zettl, H. Bando, A. Thess, and R. E. Smalley, *Science* **278**, 100 (1997).
- [39] C. Niu, E. K. Sichel, R. Hoch, D. Moy, and H. Tennet, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1480 (1997).
- [40] P. L. McEuen, *Nature* **393**, 15 (1998).
- [41] S. J. Tans, A. R. M. Verschueren, and C. Dekker, *Nature* **393**, 49 (1998).
- [42] G. Che, B. B. Lakshmi, E. R. Fisher, and C. R. Martin, *Nature* **393**, 346 (1998).
- [43] A. C. Dillon, K. M. Jones, T. A. Bekkedahl, C. H. Kiang, D. S. Bethune, and M. J. Heben, *Nature* **386**, 377 (1997).
- [44] Y. Saito, S. Uemura, and K. Hamaguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, L346 (1998).
- [45] M. R. Pederson, and J. Q. Broughton, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2689 (1992).
- [46] P. W. Ajayan, and S. Iijima, *Nature* **361**, 333 (1993).
- [47] E. Dujardin, T. W. Ebbesen, H. Hiura, and K. Tanigaki, *Science* **265**, 1850 (1994).
- [48] See, e.g. M. S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus, *Adv. Phys.* **30**, 139 (1981), H. Kamimura, *Phys. Today* **40** (12), 64 (1987) and references therein.
- [49] R. C. Haddon, A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, D. W. Murphy, S. J. Duclos, K. B. Lyons, B. Miller, J. M. Rosamilia, R. M. Fleming, A. R. Kortan, S. H. Glarum, A. V. Makhija, A. J. Muller, R. H. Eick, S. M. Zahurak, R. Tycko, G. Dabbagh, and F. A. Thiel, *Nature* **350**, 320 (1991).
- [50] A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, R. C. Haddon, D. W. Murphy, S. H. Glarum, T. T. M. Palstra, A. P. Ramirez, and A. R. Kortan, *Nature* **350**, 600 (1991).
- [51] M. J. Rosseinsky, A. P. Ramirez, S. H. Glarum, D. W. Murphy, R. C. Haddon, A. F. Hebard, T. T. M. Palstra, A. R. Kortan, S. M. Zahurak, and A. V. Makhija, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2830 (1991).
- [52] K. Holczer, O. Klein, S. M. Huang, R. B. Kaner, K. J. Fu, R. L. Whetten, and F. Diederich, *Science* **252**, 1154 (1991).
- [53] A. Maiti, C. J. Brabec, C. Roland, and J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2468 (1994).
- [54] C. J. Brabec, A. Maiti, C. Roland, and J. Bernholc, *Chem. Phys. Lett.* **236**, 150 (1995).

- [55] A. Maiti, C. J. Brabec, C. Roland, and J. Bernholc, *Phys. Rev. B* **52**, 14850 (1995).
- [56] C. F. Cornwell, and L. T. Wille, *Chem. Phys. Lett.* **278**, 262 (1997).
- [57] A. Maiti, C. J. Brabec, and J. Bernholc, *Phys. Rev. B* **55**, R6097 (1997).
- [58] C. H. Kiang, and W. A. Goddard III, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2515 (1996).
- [59] Y. H. Lee, S. G. Kim, and D. Tománek, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2393 (1997).
- [60] M. Yudasaka, R. Yamada, N. Sensui, T. Wilkins, T. Ichihashi, and S. Iijima, *J. Phys. Chem. B* **103**, 6224 (1999).
- [61] J. C. Charlier, A. D. Vita, X. Blase, and R. Car, *Science* **275**, 646 (1997).
- [62] Y. K. Kwon, Y. H. Lee, S. G. Kim, P. Jund, D. Tománek, and R. E. Smalley, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2065 (1997).
- [63] M. B. Nardelli, C. Brabec, A. Maiti, C. Roland, and J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 313 (1998).
- [64] M. B. Nardelli, C. Roland, and J. Bernholc, *Chem. Phys. Lett.* **296**, 471 (1998).
- [65] O. A. Louchev, and Y. Sato, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 194 (1999).
- [66] D. H. Oh, and Y. H. Lee, *Phys. Rev. B* **58**, 7407 (1998).
- [67] B. Delley, *J. Chem. Phys.* **92**, 508 (1990).
- [68] A. Oshiyama and B. D. Yu, *Thin Solid Films* **272**, 364 (1995).
- [69] S. Iijima, T. Ichihashi, and Y. Ando, *Nature* **356**, 776 (1992).
- [70] A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 130 (1995).
- [71] S. Jeong, and A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5366 (1998).
- [72] C. H. Xu, C. Z. Wang, C. T. Chan, and K. M. Ho, *J. Phys. Condens. Matter* **4**, 6047 (1992).
- [73] I. Kwon, R. Biswas, C. Z. Wang, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **49**, 7242 (1994).
- [74] C. Z. Wang, K. M. Ho, and C. T. Chan, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 611 (1993).
- [75] C. Z. Wang, K. M. Ho, and C. T. Chan, *Phys. Rev. B* **47**, 14835 (1993).
- [76] C. Z. Wang, and K. M. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1184 (1993).
- [77] B. L. Zhang, C. Z. Wang, and K. M. Ho, *Chem. Phys. Lett.* **193**, 225 (1992).
- [78] J. R. Morris, C. Z. Wang, and K. M. Ho, *Phys. Rev. B* **52**, 4138 (1995).

- [79] J. R. Morris, C. L. Fu, and K. M. Ho, *Phys. Rev. B* **54**, 132 (1996).
- [80] A. P. Horsfield, P. D. Godwin, D. G. Pettifor, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **54**, 15773 (1996).
- [81] P. D. Godwin, A. P. Horsfield, D. G. Pettifor, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **54**, 15776 (1996).
- [82] D.S. Portal, E. Artacho, J. M. Soler, A. Rubio, and P. Ordejón, *Phys. Rev. B* **59**, 12678 (1999).
- [83] X. Blase, L. X. Benedict, E. L. Shirley, and S. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1898 (1994).
- [84] J. C. Charlier, P. Lambin, and T. W. Ebbesen, *Phys. Rev. B* **54**, R8377 (1996).
- [85] J. W. Mintmire, and C. T. White, *Appl. Phys. A* **67**, 65 (1998).
- [86] H. J. Choi, and J. Ihm, *Phys. Rev. B* **59**, 2267 (1999).
- [87] A. Rubio, D.S. Portal, E. Artacho, P. Ordejón, and J. M. Soler, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3520 (1999).
- [88] J. Kürti, G. Kresse, and H. Kuzmany, *Phys. Rev. B* **58**, R8869 (1998).
- [89] P. Hohenberg, and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, 864B (1964).
- [90] W. Kohn, and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, 1133A (1965).
- [91] D. M. Ceperley, and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [92] J. P. Perdew, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
- [93] N. Troullier, and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
- [94] O. Sugino, and A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1858 (1992).
- [95] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 1045 (1992).
- [96] M. Levy, *Phys. Rev. A* **26**, 1200 (1982).
- [97] D. R. Hamann, M. Schüter, and C. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1494 (1979).
- [98] G. P. Kerker, *J. Phys. C* **13**, L189 (1980).
- [99] L. Goodwin, A. J. Skinner, and D. G. Pettifor, *Europhys. Lett.* **9**, 701 (1989).

Acknowledgement

I would like to express my sincerest gratitude to Prof. Atsushi Oshiyama, who introduced me to this field of research, for his guidance, valuable discussions, critical reading of the manuscript and his continual encouragements. I am also grateful to Prof. Satoshi Takada, Prof. Kenji Nakao and Prof. Dai S. Hirashima for examining the present thesis and fruitful discussions. I would like to thank Dr. Susumu Okada for valuable discussions and useful comments. Many stimulating discussions with the members of the research group at the University of Tsukuba are much acknowledged.

The computations in this thesis have been done using the facilities of the Information Center, University of Tsukuba and the facilities of the Computer center, Tohoku University.

Finally, I thank my parents for mental and financial supports.