

# 1997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

(1997年4月～1998年3月)

## 目次

### I. はじめに

### II. 研究内容概要

1. 第一原理分子動力学法への共役勾配法の導入..... 1  
東北大学金属材料研究所 裴栄造、大野かおる、川添良幸
2. 過冷却液体ならびにアモルファスの粘弾性挙動と構造変化..... 2  
東北大学金属材料研究所 相原智康、川添良幸
3. ナノスケールで変化した傾斜構造の物理的・力学的挙動の原子レベル  
シミュレーション..... 3  
東北大学金属材料研究所 正朋祥、相原智康、川添良幸
4. タイトバインディング分子動力学法による遷移金属クラスターの安定構造  
と磁性..... 5  
東北大学金属材料研究所 種田晃人、Keivan Esfarjani、川添良幸
5. 全電子混合基底法のマイクロクラスターおよびバルクへの適用..... 7  
東北大学金属材料研究所 大野かおる、志賀圭一郎、裴栄造、石井 聡、  
川添良幸  
名古屋工業技術研究所 丸山豊  
青森公立大学 神山博
6. ポリマー溶液および結晶成長モデルのシミュレーション..... 10  
東北大学金属材料研究所 大野かおる、志田和人、佐原亮二、川添良幸

7. GaAs(001)As リッチ表面に吸着した C<sub>60</sub> の格子膨張メカニズム…………… 14  
 東北大学金属材料研究所 大野かおる、李 志強、神山 博、川添良幸、  
 Q. Xue、長谷川幸雄、櫻井利夫  
 日立製作所(株)中央研究所 橋詰富博  
 名古屋大学理学部 篠原久典
8. 大規模計算における並列機の効率…………… 15  
 東北大学金属材料研究所 水関博志、佐原亮二、Keivan Esfarjani、  
 李志強、大野かおる、川添良幸
9. ポテンシャルの繰り込みを考慮した BCC 格子モデルによる Si 結晶成長を  
 再現する3次元モンテカルロシミュレーション…………… 18  
 東北大学金属材料研究所 佐原亮二、水関博志、大野かおる、福田承生、  
 川添良幸  
 三菱マテリアル 宇田 聡
10. Hydrodynamic simulation of melting sample in cell under microgravity…… 21  
 Z. Zeng<sup>a</sup>, H. Mizuseki<sup>a</sup>, K. Ichinoseki<sup>a</sup>, K. Higashino<sup>b</sup> and Y. Kawazoe<sup>a</sup>  
<sup>a</sup> Institute for Materials Research, Tohoku Univ.  
<sup>b</sup> Space Experiment System Development, IHI
11. Application of Spectral Analysis during Czochralski Growth of Oxide  
 Crystals…………… 23  
 V. V. Kochurikhin, H. Taneda, K. Shimamura and T. Fukuda,  
 Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
12. 過冷却液体ならびに非晶質固体の結晶化挙動に関する  
 分子動力的研究…………… 25  
 東北大学金属材料研究所 三田成志、相原智康、川添良幸
13. 三元系状態図と FCC/L12 整合界面における不純物の  
 析出効果との関係…………… 27  
 東北大学金属材料研究所 汪 海萍、Marcel H. F. Sluiter, 川添良幸
14. 格子モデルシミュレーションによる高分子溶液の種々の物性の評価…… 30  
 東北大学金属材料研究所 志田和人、大野かおる、川添良幸

15.  $C_{60}$ とCu原子の第一原理分子動力学計算..... 32  
 東北大学金属材料研究所 志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸  
 名古屋工業技術研究所 丸山豊
16. 全電子混合基底法によるプログラム開発と応用..... 35  
 名古屋工業技術研究所 丸山 豊  
 東北大学金属材料研究所 大野かおる、川添良幸
17. 高磁場勾配及び均一磁場×磁場勾配マグネットの設計..... 37  
 東北大学金属材料研究所 田上将之、本河光博
18. X線光電子スペクトル(XPS)測定中のX線照射による  
 $Na_2 [Fe(CN)_5(NO)] \cdot 2H_2O$ の化学形態変化:DV-X $\alpha$ 分子軌道法による  
 X線照射損傷機構の推定..... 38  
 東北大学金属材料研究所 奥 正興、松田秀幸、我妻和明
19. ランダムネスを持つ超伝導体に対する数値シミュレーション..... 39  
 東北大学金属材料研究所 小山富男
20. Mn酸化物における軌道の自由度と相分離..... 41  
 名古屋大学工学部 岡本敏史  
 東北大学金属材料研究所 前川禎通、石原純夫
21. 拡張t-J模型における一粒子励起スペクトルの温度変化..... 42  
 名古屋大学工学部 柴田康雅  
 東北大学金属材料研究所 遠山貴巳、前川禎通
22. エッジ共有型一次元CuO<sub>2</sub>鎖の電子状態と磁氣的相互作用..... 43  
 名古屋大学工学部(東北大学金属材料研究所) 水野義明  
 東北大学金属材料研究所 遠山貴巳、前川禎通
23. Electronic States and Excitation Spectra of Copper Oxides with Ladder  
 and / or Chain..... 45  
 Y. Mizuno<sup>a,b</sup>, T. Tohyama<sup>b</sup> and S. Maekawa<sup>b</sup>  
<sup>a</sup> Department of Applied Physics, Nagano Univ.  
<sup>b</sup> Institute for Materials Research, Tohoku Univ.

24. Electronic states and magnetic properties of edge-sharing Cu-O chains..... 48  
 Y. Mizuno<sup>\*1,\*2</sup>, T. Tohyama<sup>\*2</sup>, S. Maekawa<sup>\*2</sup>, T. Osafune<sup>\*3</sup>, N. Motoyama<sup>\*3</sup>,  
 H. Eisaki<sup>\*3</sup> and S. Uchida<sup>\*3</sup>  
<sup>1</sup> Department of Applied Physics, Nagano Univ.  
<sup>2</sup> Institute for Materials Research, Tohoku Univ.  
<sup>3</sup> Department of Superconductivity, Tokyo Univ.
25. 混合状態における準粒子励起とド・ハース-ファン・アルフェン効果..... 59  
 東北大学金属材料研究所 高橋三郎
26. 層状ペロフスカイト型マンガン酸化物における圧力効果..... 60  
 東北大学金属材料研究所 石原純夫、前川禎通  
 名古屋大学工学部 岡本敏史
27. マンガン酸化物の強磁性金属相におけるホールの運動..... 62  
 東北大学金属材料研究所 小椎八重航、前川禎通
28. 厳密対角化法による  $t$ - $J$  模型の励起スペクトルの研究..... 64  
 東北大学金属材料研究所 遠山貴巳、前川禎通
29. 単材粒子の計算機シミュレーション..... 66  
 東北大学金属材料研究所 川添良幸、余京智  
 東北大学学際センター 徳田昌則  
 東北大学経済学部 石垣政裕  
 日生化学工業 屈明昌
30. 電子ビーム励起による半導体の機能評価 —CL/EBIC 像の解析..... 67  
 東北大学金属材料研究所 関口隆史
31. 閃亜鉛鉱型 MnTe-MnSb 混晶系の電子状態と磁氣的相互作用..... 68  
 大阪大学大学院基礎工学研究科、東北大学金属材料研究所 白井正文
32.  $C_{60}$  の状態方程式と圧力誘起相転移..... 69  
 岩手大学工学部 長谷川正之

33. 分子動力学法の格子欠陥への応用..... 71  
岩手大学人文社会科学科 進藤浩一  
岩手大学工学部 西館数芽  
東北大学金属材料研究所 大野かおる
34. カस्प磁場印加下におけるシリコン融液の対流3次元構造..... 72  
九州大学機能物質科学研究所 柿本浩一
35. セレニウム・クラスターの第一原理的分子動力学計算..... 74  
金沢大学理学部計算科学科 上原健太郎、石飛昌光、小田竜樹、樋渡保秋  
東北大学金属材料研究所 鈴木謙爾
36. 2次元 t-J モデルにおける非磁性不純物効果..... 76  
岩手大学工学部 小田島聡
37. 準結晶・アモルファス・液体金属の動的性質と電子状態..... 78  
姫路工業大学理学部 石井 靖
38. 強相関電子系の電子状態..... 79  
成蹊大学工学部 松本秀樹
39. 強く乱れた絶縁層を持つトンネル接合の電気伝導..... 81  
名古屋大学工学部 伊藤博介、井上順一郎  
東北大学金属材料研究所 前川禎通
40. ホールによって誘起された  $\text{LaCoO}_3$  の磁性..... 83  
名古屋大学工学部 筒井健二、井上順一郎  
東北大学金属材料研究所 前川禎通
41. 2次元ハバードモデルのスピンと電荷の励起スペクトル..... 84  
ブラジリア大学 ICCMP 西川泰一郎  
東北大学金属材料研究所 小山富男
42. Electronic structure and dynamics of nanotubes by the self-consistent tight-binding method..... 85  
Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

### III. 論文リスト

#### [1]. 原著論文

<1997年>

1. Molecular Dynamics Study on Microstructure in Phase Separated Binary Lennard-Jones Liquid..... 87  
Progress of Theoretical Phys. Suppl., No.126 (1997) pp.355-358  
Tomoyasu Aihara, Jr. and Yoshiyuki Kawazoe
2. Oxidation behavior of sputter-deposited Cu-Ta alloys in air..... 91  
Mater. Sci. Engin. A226-228(1997) pp.925-929.  
K. Asami, T. Moriya, T. Aihara Jr. , K. Hashimoto, T. Masumoto
3. First-Principles Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO<sub>2</sub>..... 96  
Phys. Rev. Lett. Vol.78, No.21 (1997) pp.4063-4066  
K. Parlinski, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe
4. Stability and Vibrational Spectra of Toroidal Isomers of C<sub>240</sub>..... 100  
Z. Phys. D41 (1997) pp.73-76  
Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Satoshi Itoh, Sigeo Ihara  
and Yoshiyuki Kawazoe
5. Unique Magnetic Properties of Microclusters and Their Application to Multi-valued Magnetic Recording Media..... 104  
Journal of Korean Phys. Soc. Vol.31, No.3 Sept. (1997) pp.482-485  
Y. Kawazoe, Z. Q. Li, J. Z. Yu, H. Mizuseki, M. Ishihara, K. Tanaka,  
Y. Hashi and N. Ohta
6. Computer simulation of ferroelastic phase transition in LaNbO<sub>4</sub>..... 108  
J. Mater. Res., Vol.12, No.9 (1997) pp.2428-2437  
K. Parlinski, Y. Hashi, S. Tsunekawa and Y. Kawazoe
7. Domain pattern formation in ferroelastic Pb<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> by computer simulation..... 118  
J. Mater. Res., Vol.12, No.9 (1997) pp.2366-2373  
K. Parlinski and Y. Kawazoe

8. Advanced Materials Research on Nanoscale Systems by Large Scale  
Computer Simulations..... 126  
Journal of Korean Phys. Soc. (Proc. Suppl.) Vol.31, Sept. (1997)  
pp.s286-s291  
Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Local Magnetism of 3d and 4d Impurities in Ag and Pd Clusters..... 132  
J. Phys. I France 7 (1997) pp.1233-1244  
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, Z. Q. Li, J. T. Wang and Y. Kawazoe
  
10. A Recording Process Simulation for Double-Layered Magneto-Optical  
Disk..... 144  
IEEE Trans. Magn. Vol.33, No.5, Sept. (1997) pp.4149-4151  
M. Ishihara, H. Mizuseki, Y. Kawazoe and N. Ohta
  
11. Ferromagnetic instanton interference in magnetic fields  
— Detailed calculation of tunneling-rate..... 147  
Mod. Phys. Lett. B, Vol.11, No.14 (1997) pp.599-608  
Rong Lu, Jia-Lin Zhu, Jian Wu, Xi Chen, Lee Chang  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Magnetoconductance Fluctuations in a Mesoscopic Quantum Ring..... 157  
Nonlinear Optics, Vol.18 No.2-4 (1997) pp.193-196  
Masahito Ishihara, Hao Chen, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Parallelized Simulation of Complicated Polymer Structures  
and Its Efficiency..... 161  
IEICE Trans. Inf. Syst., Vol.E80-D, No.4 (1997) pp.531-537  
Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Masayuki Kimura  
and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Single-ion, dot-size and dot-shape effects on two electron spectra in  
quantum dots..... 169  
Nonlinear Optics Vol.18 No.2-4 (1997) pp.189-192  
Jia-Lin Zhu, Z. Q. Li, Y. Kawazoe and T. Yao

15. Macroscopic magnetization tunneling and coherence in  
antiferromagnetic particles..... 173  
Phys. Lett. A 226 (1997) pp.112-116  
Rong Lu, Jia-Lin Zhu, Xi Chen, Lee Chang and Yoshiyuki Kawazoe
  
16. Chemical Change of Nitrosylpentacyanoferrate ( II ) during XPS  
Measurements:Identification of the irradiated product by DV-X $\alpha$   
Molecular Orbital Calculations..... 178  
J. Chem. Soc. Faraday Trans., 93 No.6 (1997) pp.1061-1063  
Masaoki Oku, Hideyuki Matsuta and Kazuaki Wagatsuma
  
17. Numerical Simulations for Superconductors with Strong Randomness..... 181  
Physica C 282-287 (1997) pp.1861-1862  
T. Koyama and S. Odashima
  
18. Tight-binding method for copper clusters; Ground state studies  
of Cu<sub>3</sub> – Cu<sub>13</sub>..... 183  
Phys. Rev. B 54, 4519 (1997) p.99  
A. Taneda, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
  
19. Pressure Effects in Manganites with Layered Perovskite Structure..... 184  
Journal of Phys. Soc. Jpn., Vol. 66, No.10 (1997) pp.2965-2968  
Sumio Ishihara, Satoshi Okamoto and Sadamichi Maekawa
  
20. Interplay of Spin and Orbital Orderings in Perovskite Manganites..... 188  
Journal of Phys. Soc. Jpn., Vol. 66, No.4 (1997) pp.957-960  
Wataru Koshibae, Yuhki Kawamura, Sumio Ishihara,  
Satoshi Okamoto, Jun-ichiro Inoue and Sadamichi Maekawa
  
21. Effects of Orbitals on the Magnetization Process in Manganites..... 192  
Journal of Phys. Soc. Jpn., Vol. 66, No.10 (1997) pp.2985-2988  
W. Koshibae, Y. Kawamura, J. Inoue and S. Maekawa
  
22. Magnetic and Orbital Excitations in Manganese Oxides..... 196  
Physica B 230-232 (1997) pp.1058-1060  
W. Koshibae, S. Ishihara, Y. Kawamura, S. Okamoto, J. Inoue  
and S. Maekawa



23. Spin and Orbital orderings in Perovskite Manganites..... 199  
 Physica B 237-238 (1997) pp.48-50  
 W. Koshibae, Y. Kawamura, S. Ishihara, S. Okamoto, J. Inoue  
 and S. Maekawa
24. Raman Scattering by Orbital Waves in Perovskite LaMnO<sub>3</sub>..... 202  
 Physica B 237-238 (1997) pp.51-53  
 J. Inoue, S. Okamoto, S. Ishihara, W. Koshibae, Y. Kawamura  
 and S. Maekawa
25. Systematics of the ARPES Spectral Function of Cuprates:  
 Insulator, Hole- and Electron-doped Superconductors..... 205  
 Phys. Rev. Lett. Vol.80 (1997) pp.4245-4248  
 C. Kim, P. J. White, Z. -X. Shen, T. Tohyama, Y. Shibata, S. Maekawa,  
 B. O. Wells, Y. J. Kim, R. J. Birgeneau and M. A. Kastner
26. Cathodoluminescence Study of InCaAs/GaAs Quantum Dots Formed on the  
 Tetrahedral-Shaped Recesses..... 210  
 Nonlinear Optics, Vol.18 (1997) pp.311-314  
 Takashi Sekiguchi, Yoshiki Sakuma, Yuji Awano and Naoki Yokoyama
27. The Dependence of the Phase Diagram on the Range of the Attractive  
 Intermolecular Forces..... 214  
 J. Phys.: Condens. Matter 9 (1997) pp.3361-3370  
 M. Hasegawa and K. Ohno
28. Preparation of high purity uranium metal from aqueous solutions..... 224  
 Journal of Alloys and Compounds 255 (1997) pp.98-101  
 Y. Shiokawa, K. Hasegawa, K. Konashi, M. Takahashi, K. Suzuki
29. First-Principles Molecular Dynamics Simulations for  
 Se<sub>8</sub> and Se<sub>8</sub><sup>+</sup> Clusters..... 228  
 Molecular Simulation, Vol.19 (1997) pp.75-84  
 K. Uehara, M. Ishitobi, T. Oda and Y. Hiwatari

30. First-Principles Molecular Dynamics Calculation of Selenium Clusters··· 238  
 Z. Phys. D40 (1997) pp.472-475  
 K. Uehara, M. Ishitobi, T. Oda, Y. Hiwatari
31. Ion mobility measurements of metal halide clusters·········· 242  
 Z. Phys. D40 (1997) pp.476-478  
 M. Maier-Borst, P. Löffler, J. Petry, D. Kreisle
32. Local properties in the two-dimensional t-t'-U model·········· 245  
 Physica B 230-232 (1997) pp.912-914  
 Adolfo Avella, Ferdinando Mancini, Hideki Matsumoto, Dario Villani
33. Electronic states in the t-J model·········· 248  
 Physica C 282-287 (1997) pp. 1773-1774  
 Hideki Matsumoto, Taiichiro Saikawa, Ferdinando Mancini, and Dario Villani
34. Fermi surface and density of states in the two-dimensional t-t'-U model··· 250  
 Physica C 282-287 (1997) pp.1759-1760  
 A. Avella, F. Mancini, D. Villani and H. Matsumoto
35. The superconducting gap in the two-dimensional Hubbard model········ 252  
 Physica C 282-287 (1997) pp.1757-1758  
 A. Avella, F. Mancini, D. Villani and H. Matsumoto
36. Local magnetic moments induced by a nonmagnetic impurity  
 in the two-dimensional t—J model·········· 254  
 Phys. Rev. B, Vol.56 No.1 (1997) pp.126-129  
 S. Odashima and H. Matsumoto
37. Auxiliary boson approach for electronic states in the two-dimensional  
 Hubbard model·········· 258  
 Phys. Rev. B, Vol.56 (1997) pp.4464-4478  
 T. Saikawa, A. Ferraz, P. E. de Brito and H. Kaga

<1998 年>

1. Vibrational modes and IR analysis of neutral photopolymerized  $C_{60}$  dimers..... 286  
Phys. Rev. B, Vol.57 No.1 (1998) pp.223-229  
Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Jun Onoe, Kazuo Takeuchi  
and Yoshiyuki Kawazoe
2. Tight-binding parametrization of transition metal elements from LCAO ab initio Hamiltonians..... 293  
Computational Materials Science 9 (1998) pp.343-347  
Akito Taneda, Keivan Esfarjani, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
3. Lack of a *trans-cisoid* phase in cis-polyacetylene..... 298  
Phys. Rev. B, Vol.57 No.1 (1998) pp.6-9  
C. Q. Wu, J. Miao, J. Z. Yu and Yoshiyuki Kawazoe
4. Comparison of electronic transport through triple electric-barrier structures and triple magnetic-barrier structures..... 302  
Phys. Lett. A 238 (1998) pp.185-191  
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
5. Effects of cluster-cluster interactions on the structure and magnetic properties in  $(Fe_6)_2$ ..... 309  
Mater. Sci. Eng. A 241 (1998) pp.137-140  
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, J. T. Wang and Y. Kawazoe
6. A new model of DLA under high magnetic field..... 313  
Computational Materials Science 10 (1998) pp.46-50  
Hiroshi Mizuseki, Kazumi Tanaka, Keiko Kikuchi, Kaoru Ohno  
and Yoshiyuki Kawazoe
7. Micromagnetic study of ultrathin magnetic films..... 318  
Computational Materials Science 10 (1998) pp.198-204  
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe



15. Electron momentum distributions in elemental semiconductors  
 probed by positrons..... 368  
 Phys. Rev. B, Vol.57 No.19 (1998) pp.12219-12228  
 Z. Tang, M. Hasegawa, T. Chiba, M. Saito, H. Sumiya, Y. Kawazoe  
 and S. Yamaguchi
  
16. Quantum approach for magnetic multilayers at finite  
 temperatures..... 378  
 Phys. Rev. B, Vol.57 No.13 (1998) pp.7863-7869  
 Lei Zhou, Liangbin Hu, Zhifang Lin, Yoshiyuki Kawazoe and Ruibao Tao
  
17. First-Principles Study of the Magnetic and the Electronic Properties..... 385  
 of Fem/Aun Multilayers  
 J. Magn. Magn. Mat. Vol.183 (1998) pp.42-48  
 Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
  
18. Variational perturbation calculations for the phase diagram  
 of systems with short-ranged interactions..... 392  
 J. Chem. Phys.,108 No.1 (1998) pp.208-217  
 M. Hasegawa
  
19. Superconducting Properties of CeRu<sub>2</sub>..... 402  
 Journal of Phys. Soc. Jpn., Vol.67, No.1 (1998) pp.272-279  
 Masato Hedo, Yoshihiko Inada, Etsuji Yamamoto, Yoshinori Haga,  
 Yoshichika Onuki, Yuji Aoki, Taturma D. Matsuda, Hideyuki Sato  
 and Saburo Takahashi

[2]. 国際会議発表

1. Phase Stability of the Sigma Phase in Fe-Cr Based Alloys..... 410  
Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol.408 (1996) pp.369-374  
Marcel H. F. Sluiter, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
2. Annealing of Domain Pattern of Ferroelastic LaNbO<sub>4</sub> by Computer  
Simulation..... 416  
Inst. Nucl. Phys., Annual Report  
Poland (1996) pp.186-188  
K. Parlinski, Y. Hashi, S. Tsunekawa and Y. Kawazoe
3. Two Dimensional EBIC Study of Extended Defects in Silicon..... 419  
Proc. of the Kazusa Akademia Park Forum on the Science  
and Technology of Silicon Materials (1997) pp.369-372  
Takashi Sekiguchi, Susumu Kusanagi and Koji Sumino
4. Can Materials Properties be Predicted before Experiments?  
-Large Scale Computer Simulations by the First Principles Approach-..... 423  
Australasia-Pacific Forum on Intelligent Processing and Manufacturing of  
Materials, Australia (1997) pp.955-960.  
Yoshiyuki Kawazoe
5. Modeling of Mixing Enthalpy of Amorphous Forming Ternary Alloys by  
Rapid Quenching..... 429  
CALPHAD X X X VI(Florida,1997) p.c5  
J. Z. Yu, Y. Kawazoe and M. Tokuda
6. Positron 2D-ACAR in Perfect Crystals of Diamond, Si and Ge:  
First-Principles Calculations and Experiments..... 430  
Mat. Sci. Forum, Switzerland, Vol.255-257 (1997) pp.411-413  
Z. Tang, M. Hasegawa, T. Chiba, M. Saito, H. Sumiya, Z. Q. Li,  
T. Akahane, Y. Kawazoe, and S. Yamaguchi



13. Efficiency of Parallel Machine for Large-Scale Simulation in  
Computational Physics..... 460  
High Performance Computing, ISHPC`97, Fukuoka, (1997) pp.382-388  
Hiroshi Mizuseki, Keivan Esfarjani, Zhi Qiang Li, Kaoru Ohno,  
Yoko Akiyama, Kyoko Ichinoseki and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Molecular Dynamics Simulation of Mechanical Properties of  
Amorphous Alloys..... 468  
The 126th TMS Annual Meeting & Exhibition, Florida (1997) p.146  
Tomoyasu Aihara Jr., Tsuyoshi Masumoto and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Application of Computational Physics Techniques to the Design of New  
Nanoscale Devices : Nano-Diodes and Nano-Transistors..... 469  
Australasia-Pacific Forum on Intelligent Processing and Manufacturing of  
Materials, Australia (1997) pp.171-176.  
K. Esfarjani, Y. Hashi, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
  
16. Effects of Strong Randomness on S-Wave Super-Conductors..... 475  
Advances in Superconductivity IX, Proceedings of the 9th International  
Symposium on Superconductivity, Sapporo, (1997) pp.295-298  
T. Koyama and S. Odashima
  
17. A Mathematical Model for Unsteady State Coal Particle Coinbustion..... 479  
2nd International Congress on the Science and Technology  
of Ironmaking and 57th Ironmaking Conference  
Tronto, Canada (1998, 3) pp.1709-1712  
Masahiro Ishigami, Mingchang Qu, Masanori Tokuda
  
18. Detection and Separation of Radioactive Fullerene Families  
by Radiochemical Techniques..... 483  
CP416, Similarities and Differences between Atomic Nuclei  
and clusters, The American Inst. of Phys., (1998) pp.261-269  
T. Ohtsuki, K. Masumoto, K. Sueki, K. Kikuchi, K. Ohno,  
Y. Maruyama and Y. Kawazoe



[3]. 紀要等

1. 第一原理分子動力学によるイオンダイナミクス  
-SrTiO<sub>3</sub> 中における陽子の拡散のシミュレーション- ..... 492  
文部省科学研究費補助金重点領域研究(1)  
「固体内高速イオンのダイナミクスとそのイオニクスへの展開」  
平成 8 年度 研究成果報告書 pp.123-128  
川添良幸、李志強
  
2. FI-STM Investigation of Fullerenes Adsorbed on the Semiconductor  
and Metal Surfaces..... 498  
Sci. Rep. RITU A44 No.1 (1997) pp.17-43  
Tomihiro Hashizume and Toshio Sakurai
  
3. Development of the Method for Preparation of Actinide Metals..... 525  
Sci. Rep. RITU A45 No.1 (1997) pp.67-70  
Y. Shiokawa , K. Hasegawa, M. Takahashi and K. Suzuki

#### IV. 予稿集リスト

<1997年>

1. インターネットによるアモルファス合金ファクトデータベース提供…………… 529  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.130  
中名生充、余京智、伊藤敏行、佐藤和弘、和田繁男、秋山庸子、  
一関京子、石原正仁、川添良幸
2. 分子動力学法による  $\text{Ni}_3\text{Al}$  ならびに Ni 結晶の非弾性変形の詳細解析… 529  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.166  
正朋祥、相原智康、川添良幸
3. タイトバインディング分子動力学法による銅クラスターの安定構造と  
振動状態…………… 529  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.226  
種田晃人、Keivan Esfarjani、川添良幸
4. 第一原理計算による  $\text{Fe}_m\text{-Au}_n$  多層膜の持つ特異な磁性の研究…………… 530  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.248  
王建涛、李志強、川添良幸
5. 非晶質ならびに過冷却液体の変形機構に関する分子動力学的研究… 530  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.328  
相原智康、川添良幸
6. Tersoff ポテンシャルを繰り込んだ BCC 格子モデルによるシリコン  
結晶成長期の熱力学的特性…………… 530  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.382  
佐原亮二、水関博志、大野かおる、宇田 聡、福田承生、川添良幸
7. 逆位相境界の規則—不規則変態…………… 531  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.383  
M.Sluiser、汪海萍、川添良幸
8. 整合界面における分離効果…………… 531  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.388  
汪海萍、M.Sluiser、川添良幸

9. 直接法による SrTiO<sub>3</sub> のフォノン・スペクトル及び相転移の研究…………… 531  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1997) p.389  
李志強、K. Parlinski、川添良幸
10. 液体急冷法でアモルファスになり易い三元系合金の過剰ギブス自由  
エネルギーのモデリング…………… 532  
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) p.476  
余京智、川添良幸、徳田昌則、
11. FCC 格子モデルによる二元系合金の規則-不規則変態過程の  
モンテカルロシミュレーション…………… 533  
平成 9 年度電気関係学会東北支部連合大会 (1997) p.30  
市川浩、佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
12. 東北大学金属材料研究所 imr21 ネットワークの構築…………… 534  
平成 9 年度電気関係学会東北支部連合大会 (1997) p.265  
一関京子、和田繁男、伊藤敏行、秋山庸子、中名生充、池田誠、  
川添良幸
13. C<sub>60</sub> と Li, Be 衝突過程 / レーザー照射後の C<sub>60</sub> の第一原理計算…………… 535  
金研研究会「電子励起原子移動を用いた新物質創製とマテリアルデザイン」  
(1997)  
大野かおる、川添良幸
14. マイクロクラスターの配列と光有機結合変化…………… 536  
金研研究会「電子励起原子移動を用いた新物質創製とマテリアルデザイン」  
(1997)  
胡長武、粕谷厚生、隅山兼治、大野かおる、川添良幸、  
田路和幸、須藤彰三
15. C<sub>60</sub> と Cu 原子の第一原理分子動力学計算…………… 537  
日本物理学会秋季大会講演会 (1997) p.341  
志賀圭一郎、大野かおる、丸山 豊、川添良幸

16. Theoretical investigation of transport properties in finite  
magnetic superlattice..... 538  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.143  
郭永、李志強、余京智、Bing-Lin Gu、川添良幸
17.  $C_{60}$  への水分子吸着過程の第一原理分子動力学計算..... 539  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.341  
大野かおる、丸山 豊、志賀圭一郎、川添良幸、尾上 順、武内一夫
18. 全電子混合基底法による磁性金属マイクロクラスターの  
第一原理分子動力学計算..... 540  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.544  
大野かおる、丸山豊、村上純一、五十嵐一男、種村栄、  
裴栄造、志賀圭一郎、川添良幸
19. ポテンシャルの繰り込みを考慮した BCC 格子モデルによるシリコン融液  
からの結晶成長 II ..... 541  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.778  
佐原亮二、水関博志、宇田聡、大野かおる、福田承生、川添良幸
20. 星形ポリマー溶液の MC シミュレーション..... 542  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.836  
志田和人、大野かおる、川添良幸
21.  $LaCoO_3$  の電子状態 II ..... 543  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.448  
筒井健二、井上順一郎、前川禎通
22. 厳密対角化法を用いたマンガン酸化物における1粒子励起スペクトル  
の計算..... 544  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.679  
小椎八重航、前川禎通
23. TMR に対する不純物の効果..... 545  
日本物理学会秋季大会講演会(1997) p.520  
伊藤博介、熊崎隆男、井上順一郎、前川禎通

24. Small Urea Clusters: Structures, Energies, and Electronic Properties by  
*ab initio* Calculations..... 546  
1997 計算化学、理論化学討論会講演要旨集 (1997) p.168  
R. V. Belosludov, Z. Q. Li, Y. Kawazoe
25. Positron 2D-Acar Study of Bulks and Vacancies in Diamond, Graphite  
and Silicon: First-Principles Calculations and Experiments..... 547  
IUMRS-ICA-97 4th IUMRS International Conference in Asia  
OVTA, Makuhari, Chiba (1997) p.544  
Z. Tang, M. Hasegawa, T. Chiba, M. Saito, H. Sumiya, M. Takenaka,  
E. Kuramoto, Y. Kawazoe, and S. Yamaguchi
26. Off-Stoichiometry and the Thermodynamics of Anti-Phase Boundaries,  
applied to Ni<sub>3</sub>Al  $\gamma'$  phases..... 548  
IUMRS-ICA-97 4th IUMRS International Conference in Asia  
OVTA, Makuhari, Chiba (1997) p.586  
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
27. Modelling of Multi-Valued Magneto-Optical Recording in  
Granular Materials..... 549  
MORIS/ISOM'97, Yamagata, Oct. (1997) pp.272-273  
H. Mizuseki, K. Kikuchi, K. Tanaka, M. Ishihara and Y. Kawazoe
28. 第一原理計算による SrTiO<sub>3</sub> バルク及び(100)表面における  
相転移の研究..... 551  
第 23 回固体イオニクス討論会 (1997, 12 月)  
李志強、シーシトフ・パーリンスキー、川添良幸
29. 第一原理分子動力学によるイオンダイナミクス  
—SrTiO<sub>3</sub> 中における陽子の拡散のシミュレーション—..... 553  
固体内高速イオンのダイナミクスとそのイオニクスへの展開  
研究成果公開シンポジウム要旨集 (1997) pp.39-40  
川添良幸、李志強

30. imr21 ネットワークの構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 555  
 平成9年度 核融合科学研究所技術研究会(1997)pp.162-165  
 一関京子、和田繁男、佐藤和弘、伊藤敏行、秋山庸子、中名生充、  
 池田誠、川添良幸
31. 超大規模シミュレーション計算における並列計算機の可能性・・・・・・・・ 559  
 HITAC ユーザ研究会 第34回大会論文集(1997)p.145-152  
 川添良幸、水関博志、秋山庸子、一関京子
32. Magnetoresistance in tunnel junctions・・・・・・・・・・・・・・・・ 567  
 The Symposium on Strongly Correlated Electron Systems (1997)  
 H. Itoh, A. Shibata, T. Kumazaki, J. Inoue and S. Mawkawa
33. 強磁性トンネル接合における磁気抵抗効果・・・・・・・・・・・・・・・・ 568  
 第21回日本応用磁気学会学術講演概要集 (1997) p.177  
 伊藤博介、柴田彰則、井上順一郎、前川禎通
34. Can Materials Properties be Predicted before Experiments?  
 Large Scale Computer Simulations by a First Principles Approach・・・・・・・・ 569  
 IPPM'97 (1997) p.131  
 Yoshiyuki Kawazoe
35. Application of Computational Physics Techniques to the Design of  
 New "Artificially-Intelligent" Nanoscale Devices・・・・・・・・・・・・ 570  
 IPPM'97 (1997) p.63  
 K. Esfarjani

<1998年>

1. ボール・ミル中における周期的アモルファス化に関する単純モデル・・・・・・・・ 571  
 日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.81  
 M. Sluiter、川添良幸
2. アモルファス合金の空間的不均一性に関する分子動力的研究・・・・・・・・ 571  
 日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.97  
 相原智康、川添良幸

3. 共晶体の組織形成の環境依存性の研究..... 571  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.165  
水関博志、吉川彰、島村清史、福田承生、川添良幸
4. SrTiO<sub>3</sub>(001)表面における強誘電の緩和..... 572  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.169  
李志強、川添良幸
5. 遷移金属磁性材料の保磁力への量子力学的アプローチ..... 572  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.169  
周磊、余京智、川添良幸
6. 磁性体金属合金における水素の溶解度に関する理論考察..... 572  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.219  
余京智、孫強、李志強、周磊、川添良幸
7. 界面構造を制御した Ni/Ni<sub>3</sub>Al 合金の変形挙動の分子動力学解析..... 573  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.298  
正朋祥、相原智康、川添良幸
8. タイトバインディング分子動力学法による遷移金属クラスターの安定構造と磁性..... 573  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.312  
種田晃人、Keivan Esfarjani、川添良幸
9. 不純物を添加したカーボンナノチューブの第一原理計算..... 573  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.312  
Amir A. Farajian、Keivan Esfarjani、大野かおる、川添良幸
10. Au-Cu 系合金の FCC 格子モデルシミュレーションに及ぼすポテンシャル繰り込みの効果..... 574  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.342  
市川 浩、佐原亮二、水関博志、大野かおる、篠原 猛、川添良幸
11. MD ポテンシャルの格子気体モデルへの繰り込み理論..... 574  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.342  
大野かおる

12. 三元系相図とFCC/Li<sub>2</sub> 界面における不純物の析出効果との関係…………… 574  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.342  
汪海萍、M. Sluiter、川添良幸
13. 第一原理計算による(Cr,Mn,Fe)/Ag 多層膜の持つ特異な磁性の研究…………… 575  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.132  
王建涛、李 志強、川添良幸
14. 筒状有機分子シクロデキストリン中のアントラセン (C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>) の吸収…………… 576  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.210  
桧和田徹、吉成武久、大西彰正、長坂慎一郎、  
ローディオン・ベロズルドフ、川添良幸、大野かおる
15. First-Principles Studies on the Local Magnetism of Fe/Nb Multilayers…………… 577  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.423  
孫強、李志強、大野かおる、川添良幸
16. C<sub>60</sub>とAr 原子の高エネルギー衝突過程の第一原理分子動力学計算…………… 578  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.329  
志賀圭一郎、丸山豊、大野かおる、川添良幸、三浦 崇、李 相茂
17. ポテンシャルの繰り込みを考慮した BCC 格子モデルによるシリコン融液  
からの結晶成長Ⅲ…………… 579  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.702  
佐原亮二、水関博志、宇田聡、大野かおる、福田承生、川添良幸
18. 星形ポリマー溶液の MC シミュレーション(2) …………… 580  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.721  
志田和人、大野かおる、川添良幸
19. Resonant tunneling in a step barrier structure…………… 581  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.159  
郭永、Bing-Lin Gu、川添良幸
20. 混合基底法の特徴と応用…………… 582  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.108  
大野かおる



21. Mn 酸化物における軌道の自由度と相分離..... 584  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.516  
岡本敏史、前川禎通、石原純夫
22. 拡張 t-J 模型における一粒子励起スペクトルの温度変化..... 585  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.593  
柴田康雅、遠山貴巳、前川禎通
23. 閃亜鉛鉱型 MnTe-MnSb 混晶系の電子状態と磁氣的相互作用..... 586  
日本物理学会第 53 回講演概要 (1998) p.143  
白井正文
24. 全電子第一原理シミュレーションとその適用..... 587  
理研シンポジウム 第三回新世代材料プロセス  
ークラスターを用いる材料科学ー (1998) pp.51-53  
川添良幸
25. 新物質の第一原理計算とその限界および発展的検討..... 590  
平成 9 年度工業技術院集中型移動研究室  
無機、有機、生体材料の計算機シミュレーション (1998) I-1  
川添良幸
26. シリコンクラスターの安定構造と IR スペクトル..... 592  
超微粒子とクラスター懇談会第1回研究会 (1998) pp.191-194  
川添良幸、Keivan Esfarjani、橋祐一
27. Ar レーザ照射された C<sub>60</sub> の STM 像と部分電荷密度: C<sub>58</sub> の可能性? ... 596  
超微粒子とクラスター懇談会第1回研究会 (1998) pp.211-212  
大野かおる、胡長武、粕谷厚生、川添良幸、丸山豊
28. Vibrational properties and IR spectra of C<sub>60</sub> dimers..... 598  
第 14 回フラーレン総合シンポジウム  
岡崎 (1998.1) p.92  
橋祐一、Keivan Esfarjani、尾上順、武内一夫、川添良幸

29. Can doped nanotubes function as diodes? ..... 599  
 第 14 回フラーレン総合シンポジウム  
 岡崎 (1998.1) p.226  
 Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Amir A. Farajian and Yoshiyuki Kawazoe
30. Nanotube diodes ..... 600  
 超微粒子とクラスター懇談会第 2 回研究会 (1998) pp.145-148  
 Keivan Esfarjani, Amir A. Farajian, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
31. Au-Cu 系合金の FCC 格子モデルシミュレーションに及ぼすポテンシャル  
 繰り込みの効果 ..... 604  
 東北大学金属材料研究所第95回春季講演会 (1998.5) p.24  
 水関博志、一関京子、秋山庸子、大野かおる、川添良幸
32. Computer Study on Crucible Rotation in High-Temperature Solution  
 Growth Method ..... 605  
 東北大学金属材料研究所第95回春季講演会 (1998.5) p.25  
 Z. Zeng, X. Qi, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, T. Fukuda, Y. Kawazoe
33. 整合界面における不純物の析出効果 ..... 606  
 東北大学金属材料研究所第95回春季講演会 (1998.5) p.26  
 汪海萍、M.Sluite、川添良幸
34. 粒径分布のあるサイトパーコレーションモデルにおける  
 ユニバーサリティ ..... 607  
 東北大学金属材料研究所第95回春季講演会 (1998.5) p.27  
 佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
35. 酸化バナジウムの分子動力学計算 ..... 608  
 第 45 回応用物理学関係連合講演会 No.2 (1998) p.904  
 H. Chiba, T. Sato, K. Nishikawa, K. Shindo, M. Baba and K. Nishidate
36. 大規模数値計算による半導体中の物質輸送 ..... 609  
 平成 9 年度 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告  
 (1998.6) pp.18-19  
 柿本浩一



44. 金属マイクロクラスターの最安定形状と磁性に関する理論的解明..... 621  
アモルファス材料第 147 委員会 第 60 回研究会資料 (1998.6) pp.13-18  
川添良幸
45. Computer Study on Crucible Rotation in High-Temperature Solution  
Growth Method..... 627  
日本シミュレーション学会 第 17 回シミュレーション・テクノロジー  
コンファレンス(1998.6) pp27-30  
Z. Zeng, X. Qi, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, T. Fukuda and Y. Kawazoe

## V. 研究会等

1. 『核生成理論とシミュレーション』  
金研ワークショップ (1996.12)  
代表者 大野かおる
2. 『コンピューターシミュレーションによる原子・電子レベルでの材料  
創成研究会』  
日本金属学会研究グループ (1997.4,10)  
発起人・世話人 川添良幸
3. 『破壊のメゾスコピックダイナミクス』研究会  
平成9年度科研企画調査研究グループ (1997.7)  
連絡人 川添良幸
4. 『International Visualization Forum』  
コーネル大学理論センターと東北大学金属材料研究所の共同プロジェクト  
(1998.6)  
代表者 川添良幸

## VI. 受賞記事

1. 科学技術庁長官賞  
『計算機利用のための情報通信設備の改善』…………… 631  
中名生充 (1997.4.14)
2. 一般論文優秀賞(HITAC ユーザー研究会)  
『超大規模シミュレーション計算における並列計算機の可能性』…………… 632  
川添良幸、水関博志、秋山庸子、一関京子 (1997.6.5)
3. データベース創造賞(大型計算機センター)  
『金属材料文献データベースKINDの構築』…………… 633  
余京智、中名生充、伊藤敏行、佐藤和弘、秋山庸子、  
和田繁男 (1997.12.25)

## VII. 新聞記事

1. 『脳のメカニズム解明へ』…………… 635  
日刊工業新聞 (1997.11.8)
2. 『金研一般公開』…………… 636  
日刊工業新聞 (1997.11.18)
3. 『カーボン・ナノチューブのダイオード機能確認』…………… 637  
日刊工業新聞 (1997.11.27)
4. 『マルチメディアラボ新年度仙台に設置』…………… 638  
河北新報 (1997.2.26)
5. 『六カ国語パンフ作成』…………… 639  
河北新報 (1998.5.29)
6. 『インターネットで交流』…………… 640  
河北新報 (1998.2.27)

## VIII. 雑誌掲載解説記事

1. 『金属マイクロクラスターの示す特異な磁性とそれを活用した3次元  
超高密度磁気記録媒体の可能性』…………… 641  
川添良幸  
まてりあ 第35巻 第8号 (1996) pp.840-842
2. 『多部門多目的データベース構築のための基礎的研究』…………… 644  
ネットワーク代表者 金属材料研究所 川添良幸  
東北大学学報 第1444号別冊 (1997) pp.110-111
3. 『全国共同利用大型計算機センター顕彰「データベース創造賞」受賞』… 645  
金研材料プロセス・評価研究部情報・広報室および  
技術室企画情報班の6名  
東北大学学報 第1456号 (1998) pp.7-8

4. 『実験と理論  
—最新のクラスター基材料研究の話題を中心に—』…………… 646  
川添良幸  
Bull. Cluster Sci. Tech., Vol.1, No.1 (1997) pp.24-28
5. 『所感』…………… 652  
金属材料研究所 川添良幸  
`季刊フラーレン'科学と技術の最前線 (1998) p.9
6. 『Hottaimo? インターネット子ども会議』…………… 653  
"片平・チャペラル未来のまちづくり—地域の環境をみつめよう—"  
建築と子供たちネットワーク仙台 1997 年度報告書 (1998) pp.22-24
7. 『水溶液電解法によるウラン、ネプツニウム金属の調整』…………… 656  
塩川佳伸、長谷川一希  
利用技術 Isotope News 2 月号(1998)pp.6-8
8. 『遊ぼう! インターネット!』…………… 659  
情報・広報室  
金属材料研究所一般公開パンフレット (1997) p.20
9. 『おいでスーパーコンピューターの世界へ』…………… 661  
情報・広報室  
金属材料研究所一般公開パンフレット (1997) p.35
10. 『21 世紀の結晶成長の3大課題』…………… 662  
金属材料研究所 川添良幸  
日本結晶成長学会誌 Vol.24 No.4 (1997) pp.43-44
11. 『21 世紀の結晶成長の3大課題』…………… 663  
九州大学機能物質科学研究所 柿本浩一  
日本結晶成長学会誌 Vol.24 No.4 (1997) p.42
12. 『Informix Dynamic Server が実現する国内初の脳画像データベース』… 664  
金属材料研究所 川添良幸  
月刊ジャバワールド 第2巻 第9号 (1998) pp.122-123
13. 『金研パンフレット』作成協力…………… 666

## IX. 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・・・・・・・・ 672
2. 情報・広報室長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員会一覧・・・・・・・・ 673
3. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・ 674
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・・・・・・・・・ 675