

# 1998 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

(1998 年 4 月～1999 年 3 月)

## 目次

- I. はじめに
- II. 研究内容概要
  1. 数値基底全電子混合基底法による第一原理分子動力学プログラムの開発..... 1  
東北大学金属材料研究所 大野かおる、志賀圭一郎、川添良幸  
通産省工業技術院名古屋工業技術研究所 丸山豊
  2. 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.... 20  
東北大学金属材料研究所 志田和人、大野かおる、川添良幸
  3. アモルファス合金の空間的不均一性に関する分子動力学的研究..... 22  
東北大学金属材料研究所 相原智康、川添良幸
  4. Atomistic Theory of the Critical Field for Intrinsic Spin Reversal in Transition Metals..... 23  
Institute for Materials Research, Tohoku University L. Zhou, Q. Sun, J. Z. Yu, D. Wang and Y. Kawazoe  
Hitachi Tohoku Software Ltd., Y. Hashi
  5. Oscillatory Marangoni Convection in Liquid Bridges Under Microgravity... 25  
Institute for Materials Research, Tohoku University Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe  
Space Experiment System Development Department, IHI K. Higashino
  6. First-Principles Studies on the Magnetic Properties of (Cr, Mn, Fe) / Ag... 27  
Monatomic Multilayers  
Institute for Materials Research, Tohoku University Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe  
Institute of Physics and Center for Condensed Matter Physics Ding-Sheng Wang

7. Ab Initio and Lattice Dynamics Computer Simulations of Inclusion Compounds..... 30  
Institute for Materials Research, Tohoku University R. V. Belosludov,  
Z. Q. Li, K. Ohno and Y. Kawazoe
  
8. 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  
弱いユニバーサリティ..... 31  
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
  
9. 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研究..... 33  
東北大学金属材料研究所 種田晃人、川添良幸
  
10. 第一原理による純 Ca の fcc-bcc 相平衡..... 39  
東北大学金属材料研究所 川合史章、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸
  
11. 整合界面における不純物の析出効果..... 41  
-Ni<sub>3</sub>Al に対する Ti 添加物の振る舞いへの応用  
東北大学金属材料研究所 汪 海萍、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸
  
12. 繰り込みポテンシャルを用いた Cu-Au 系合金の FCC 格子モデルによる  
モンテカルロシミュレーション..... 45  
東北大学金属材料研究所 市川 浩、佐原亮二、水関博志、  
大野かおる、川添良幸
  
13. Order-Disorder and Segregation Phenomena at Anti-Phase Boundaries..... 47  
Institute for Materials Research, Tohoku University M. Sluiter, H. -P. Wang  
and Y. Kawazoe
  
14. Electronic and Mechanical Properties of Carbon Nanotubes..... 49  
Institute for Materials Research, Tohoku University Keivan Esfarjani,  
Amir. A. Farajian and Y. Kawazoe  
Hitachi Tohoku Software Ltd. Y. Hashi
  
15. Effect of Lattice Coherency on Epitaxial InAs..... 50  
Institute for Materials Research, Tohoku University S. Vannarat, K. Esfarjani  
and Y. Kawazoe

16. Transport Properties of Doped Nanotube Junctions	52
Institute for Materials Research, Tohoku University Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe	
17. Experimental and Theoretical Positron-Annihilation Studies for Defects in Diamond	53
Institute for Materials Research, Tohoku University Z. Tang, M. Hasegawa, T. Shimamura, Y. Nagai and Y. Kawazoe National Institute for Research in Inorganic Materials T. Chiba NEC Information Systems, Ltd. M. Saito Sumitomo Electric Industries, Ltd. H. Sumiya	
18. 強磁性体 / 超伝導体 / 強磁性体2重トンネル接合における超伝導抑制と 磁気抵抗	55
東北大学金属材料研究所 高橋三郎、今村裕志、前川禎通	
19. CZ 酸化物融液内対流の振動現象に及ぼす内部輻射伝熱の影響	56
東北大学反応化学研究所 小林正樹、塚田隆夫、宝沢光紀 東北大学金属材料研究所 福田承生	
20. トンネル磁気抵抗効果と電子状態	58
名古屋大学大学院工学研究科量子工学専攻 伊藤博介 名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻 池田 充、井上順一郎 東北大学金属材料研究所 前川禎通	
21. 準結晶・アモルファス・液体金属の動的性質と電子状態	60
姫路工業大学理学部 石井 靖	
22. 2次元 t-J モデルにおける非磁性不純物効果	61
岩手大学工学部 小田島聡	
23. 高温超伝導体の超伝導状態の理論的研究	62
東北大学金属材料研究所 小山富男	
24. 2次元ハバードモデルの異方的な擬ギャップ状態	64
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	

25. 微小磁性金属を用いたトンネル接合系におけるクローン・ブロッキングの効果..... 65  
CREST, 東北大学金属材料研究所 今村裕志  
東北大学金属材料研究所 高橋三郎、前川禎通
26. ニッケル酸化物の光学伝導度..... 67  
東北大学金属材料研究所 筒井健二、小椎八重航、前川禎通
27. 二重交換模型の基底状態..... 68  
東北大学金属材料研究所 小椎八重航、前川禎通  
東京理科大学理学部応用物理学教室 山中雅則  
東京工業大学理学部物理学教室 押川正毅
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..... 70  
東北大学金属材料研究所 遠山貴己、前川禎通
29. 銅酸化物における超交換相互作用..... 72  
東北大学金属材料研究所 水野義明、遠山貴己、前川禎通
30. マンガン酸化物の有限温度における軌道の自由度と相分離..... 73  
東北大学金属材料研究所 岡本敏史、石原純夫、前川禎通
31. マンガン酸化物における軌道の自由度と X 線による観測の理論..... 74  
東北大学金属材料研究所 石原純夫、前川禎通
32. 拡張  $t$ - $J$  模型の一粒子励起スペクトルに対する磁氣的フラストレーション  $J'$  の効果..... 76  
東北大学金属材料研究所 柴田康雅、遠山貴己、前川禎通
33. モンテカルロ法による  $C_{60}$  分子系の相図の計算..... 78  
岩手大学工学部 長谷川正之  
東北大学金属材料研究所 大野かおる
34. 3次元ソフトパーコレーション系における動的臨界指数とユニバーサリティーの破れ..... 80  
東北大学金属材料研究所 隅山兼治  
九州大学大学院理学研究科 小田垣孝、原好彦

35. 電子ビーム励起による半導体の機能評価—CL/EBIC 像の解析…………… 83  
東北大学金属材料研究所 関口隆史
36. Generalized Gradient Approximation を含んだ All-Electron Mixed Basis  
Approach: Cu dimer 及び Fe dimer の Total Energy の評価…………… 84  
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
37. 局所場と周波数に依存する誘電応答関数の計算と  
その電子相関への応用…………… 89  
東北大学金属材料研究所 石井 聡、大野かおる、川添良幸
38. 自己組織的磁化ダイナミクスにより予測される多値記録材料…………… 90  
東北大学金属材料研究所 石原正仁、水関博志、大野かおる、川添良幸

### III. 論文リスト

#### [1]. 原著論文

##### <1997 年> (追加分)

1. Tight-Binding Calculations of Cohesive Properties and Phase Diagram of Ni-Al-X Alloy Systems..... 93  
Journal of Phase Equilibria, 18 (1997) pp.624-627  
Tetsumori Shinoda, Yoshinao Mishima, Masuda-Jindo Kinichi and Marcel Henricus Franciscus Sluiter
2. Application of Tight-Binding Electronic Theory to Phase Stability and Mechanical Properties of Intermetallic Compounds..... 97  
Journal of Phase Equilibria, 18 (1997) pp.628-634  
Masuda-Jindo Kinichi and Marcel Henricus Franciscus Sluiter
3. The Relationship between Phase Transition and Superimposition of Fermi Surface in Low Dimensional System..... 104  
Acta Physica Sinica, 46 (1997) pp.1972-1976  
Fan Lin, Xiao-Bin Chen, Rong-Tang Fu, Xin Sun and Yoshiyuki Kawazoe

##### <1998 年>

1. Nesting and Instability in a Two-dimensional System..... 109  
Phys. Stat. Sol B, 206 (1998) pp.559-565  
F. Lin, X. B. Chen, R. T. Fu, X. Sun and Y. Kawazoe
2. Resonant Tunneling in Step-barrier Structures Under an Applied Electric Field..... 116  
J. Appl. Phys., 84 (1998) pp.918-924  
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Jing-Zhi Yu, Zhong Zeng and Yoshiyuki Kawazoe
3. Can 5d Transition-metal Monolayers Be Magnetic on Ferromagnetic Substrate? ..... 123  
Solid State Commun., 106 (1998) pp.665-667  
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, Z. Zeng, Z. Q. Li, K. Ohno and Y. Kawazoe

4. Determination of the Elastic Tensor in Low-symmetry Structures..... 126  
 Europhys. Lett., 43 (1998) pp.183-188  
 M. H. F. Sluiter, M. Weinert and Y. Kawazoe
  
5. Relaxations of Nonpolar Zinc Blende (110) Surface of GaN, AlN and BN• 132  
 J. Appl. Phys., 84 (1998) pp.1977-1980  
 Zhi-Qiang Li, Hao Chen, Fan-Quan Kong, Qiang Sun and Yoshiyuki Kawazoe
  
6. Resonant Tunneling in an Aharonov-Bohm Ring with a Quantum Dot..... 136  
 Phys. Rev. Lett., 80 (1998) pp.1952-1955  
 Jian Wu, Bing-Lin Gu, Hao Chen, Wenhui Duan and Yoshiyuki Kawazoe
  
7. Adsorption of O Adatoms on Hydrogenated Si Cluster..... 140  
 Europhys. Lett., 43 (1998) pp.47-52  
 Q. Sun, J. Z. Yu, L. Zhou, Z. Q. Li, Z. Tang, K. Ohno and Y. Kawazoe
  
8. Insertion of Xe and Kr Atoms into C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Fullerenes and the Formation  
 of Dimers..... 146  
 Phys. Rev. Lett., 81 (1998) pp.967-970  
 Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Yoshiyuki Kawazoe,  
 Yutaka Maruyama and Kazuyoshi Masumoto
  
9. Relaxations of TiO<sub>2</sub>- and SrO-terminated SrTiO<sub>3</sub> (001) Surfaces..... 150  
 Phys. Rev. B., 58 (1998) pp.8075-8078  
 Zhi-Qiang Li, Jia-Lin Zhu, Chang-Qin Wu, Zheng Tang  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Spin Oscillation and its Reduction in a Quantum Dot..... 154  
 Phys. Rev. B., 58 (1998) pp.13755-13761  
 Jia-Lin Zhu, Ziqiang Zhu, Yoshiyuki Kawazoe and Takafumi Yao
  
11. 傾斜構造を持つ Ni/Ni<sub>3</sub>Al 界面の弾性挙動の  
 分子動力学シミュレーション..... 161  
 日本金属学会誌 第 62 卷 第 11 号 (1998) pp.978-985  
 相原智康、正 朋祥、川添良幸

12. Self-consistent Tight-binding Formalism for Charged Systems..... 169  
 J. Phys.: Condens. Matter, 10 (1998) pp.8257-8267  
 Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
13. Binding and Overlap Function of Incompletely Confined Excitons in  
 Quantum Dots..... 180  
 J. Phys.: Condens. Matter, 10 (1998) pp.583-587  
 Jia-Lin Zhu, Shaofeng Zhu, Ziqiang Zhu, Yoshiyuki Kawazoe  
 and Takafumi Yao
14. Exact Spectra and Spin Oscillations for Two Electrons in Quantum Dots... 185  
 Phys. Lett. A, 246 (1998) pp.157-162  
 Jia-Lin Zhu, Shaofeng Zhu, Ziqiang Zhu, Yoshiyuki Kawazoe  
 and Takafumi Yao
15. First-Principles Studies on the Structural and Magnetic Properties of  
 (Cr, Mn, Fe)/ Ag Monatomic Multilayers..... 191  
 J. Phys.: Condens. Matter, 10 (1998) pp.9655-9662  
 Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
16. Numerical Study of Dynamic Behavior of Melting Sample in Shear Cell  
 Under Microgravity..... 199  
 Numerical Heat Transfer Part A, 34 (1998) pp.709-718  
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki, Yoshiyuki Kawazoe  
 and Kazuyuki Higashino
17. Modelling of Phase Transitions by First-Principle Methods..... 209  
 Phase Transitions, 65 (1998) pp.73-77  
 Krzysztof Parlinski and Yoshiyuki Kawazoe
18. A Study of the Thermodynamics of Segregation and Partial Order at (111)  
 Antiphase Boundaries in Ni<sub>3</sub>Al..... 214  
 Philos. Mag. A, 78 (1998) pp.1353-1364  
 Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe



19. First-Principles Studies on the Local Magnetism of Fe/Nb Multilayers ···· 226  
 Phys. Lett. A, 239 (1998) pp.406-410  
 Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, Z. Q. Li, K. Ohno and Y. Kawazoe
20. Systematics of the Photoemission Spectral Function of Cuprates :  
 Insulators and Hole- and Electron-Doped Superconductors ·········· 231  
 Phys. Rev. Lett., 80 (1998) 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
21. Spin and Charge Excitations and Photoemission Spectra in 1D and 2D  
 Cuprates ·········· 235  
 J. Phys. Chem Solids, 59 (1998) pp.1897-1901  
 Sadamichi Maekawa and Takami Tohyama
22. Effect of Spin Gap on Single-Hole Excitation Spectrum in the  
 One-Dimensional  $t$ - $J$ - $J'$  Model ·········· 240  
 J. Phys. Chem Solids, 59 (1998)pp.1864-1866  
 Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
23. Magnetoresistance and De Haas-van Alphen Oscillation in Normal and  
 Superconducting CeRu<sub>2</sub> ·········· 243  
 Philos. Mag. B, 77 (1998) pp.975-1000  
 M. Hedo, Y. Inada, K. Sakurai, E. Yamamoto, Y. Haga, Y. Onuki,  
 S. Takahashi, M. Higuchi, T. Maehira and A. Hasegawa
24. Polarization Dependence of Anomalous X-ray Scattering in Orbital-ordered  
 Manganites ·········· 269  
 Phys. Rev. B, 58 (1998) pp.13442-13451  
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa
25. EBIC and Cathodoluminescence Study of the Bonded Silicon Wafers ···· 279  
 Solid State Phenomena, 63-64 (1998) pp.481-488  
 K. Ikeda, T. Sekiguchi, S. Ito and M. Suezawa

26. Resonance Splitting Effect and Wave-vector Filtering Effect in Magnetic Superlattices..... 287  
 J. Appl. Phys., 83 (1998) pp.4545-4547  
 Yong Guo, Bing-Lin Gu, Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
27. Dynamical Spin and Charge Response Functions in the Doped Two-dimensional Hubbard Model..... 290  
 Eur. Phys. J.B3, (1998) pp.17-22  
 T. Saikawa and A. Ferraz
28. Electron Concentration and On-site Interaction Effects for the Spin and Charge Excitation Spectra in the Two-dimensional Hubbard Model..... 301  
 Phys. Rev. B58, (1998) pp.1853-1861  
 T. Saikawa and A. Ferraz
29. "Flux" State in the Double-Exchange Model..... 319  
 Phys. Rev. Lett., 81 (1998) pp.5604-5607  
 Masanori Yamanaka, Wataru Koshibae and Sadamichi Maekawa
30. Superexchange Interaction in Cuprates..... 323  
 Phys. Rev. B,58 (1998) pp.R14713-R14716  
 Y. Mizuno, T. Tohyama and S. Maekawa
- < 1999 年 >
1. Incommensurate State and Spin-induced Peierls Instability..... 327  
 Phys. Rev. Lett., 82 (1999) pp.2119-2112  
 Wataru Koshibae, Masanori Yamanaka, Masaki Oshikawa and Sadamichi Maekawa
2. Electronic and Magnetic States in Doped LaCoO<sub>3</sub>..... 331  
 Phys. Rev. B,59 (1999) pp.4549-4552  
 K. Tsutsui, J. Inoue and S. Maekawa

3. Quantum Method for Calculating the Coercivities of Transition-metal  
Magnetic System..... 335  
J. Magn. Soc. Jpn., 23 (1999) pp.412-414  
L. Zhou, Q. Sun, J. T. Wang, J. Z. Yu and Y. Kawazoe
  
4. First-Principles Calculation of the Structural and Magnetic Properties of  
(Cr, Mn, Fe) / Ag Monatomic Multilayers..... 338  
J. Magn. Soc. Jpn., 23 (1999) pp.584-586  
Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
  
5. On the Metastable State of Low Dimensional Magnetic Systems..... 341  
J. Magn. Soc. Jpn., 23 (1999) pp.590-592  
Q. Sun, Y. Hashi, L. Zhou, Q. Wang, J. Z. Yu, Z. Zeng and Y. Kawazoe
  
6. Self-Organized Magnetic Recording System..... 344  
J. Magn. Soc. Jpn., 23 (1999) pp.667-669  
M. Ishihara, H. Mizuseki, K. Ohno and Y. Kawazoe
  
7. Structure and Magnetism of Small Fe Clusters..... 347  
J. Magn. Soc. Jpn., 23 (1999) pp.679-681  
A. Taneda and Y. Kawazoe
  
8. The Effect of Segregation and Partial Order on the Thermodynamics of  
(111) Antiphase Boundaries in Ni<sub>3</sub>Al..... 350  
Comput. Mater. Sci., 14 (1999) pp.283-290  
Marcel Sluiter, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. Absolute Total Energy of Small Copper Clusters in an All-electron  
Mixed-basis Approach with the Generalized-gradient Approximation..... 358  
J. Mater. Res., 14 (1999) pp.980-983  
Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Rong-Tang Fu  
and Yutaka Maruyama

10. Stabilities of Spin Configuration and Exchange Interactions in  
(Cr, Mn, Fe)/Ag Monatomic Multilayers..... 362  
Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.6974-6978  
Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li, Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe  
and Ding-Sheng Wang
  
11. Effective Ab Initio Exchange Integrals and Magnetic Phase Transition  
in fcc Fe and Mn Antiferromagnets..... 367  
Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.8387-8390  
Yu-Mei Zhou, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. The Three-fermion Problem in Two and Three Dimensions; a Unified  
Variational Approach..... 371  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 32 (1999) pp.749-756  
Amir Abbas Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
  
13. Explanation for the Configurational Heat Capacity of Ordered Phases..... 379  
Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.3280-3282  
Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
  
14. Force Constants for Substitutional Alloys..... 382  
Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.4100-4111  
Marcel H. F. Sluiter, Micheal Weinert and Yoshiyuki Kawazoe
  
15. Intermolecular Bonds Bridging Two Anthracene Molecules in A  
 $\gamma$ -Cyclodextrin..... 394  
J. Solid State Chem., 144 (1999) pp.263-271  
Rodion Belosludov, Tohru Hiwada, Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno,  
Takehisa Yoshinari, Akimasa Ohnishi and Shin-ichiro Nagasaka
  
16. Construction and Application of Materials Database for Non-Equilibrium  
and Metastable Phases..... 403  
Mater. Trans. JIM, 40 (1999) pp.424-427  
Jing-Zhi Yu, Kouki Takanasi, Toshiyuki Itoh, Takejiro Kaneko,  
Shunya Abe, Hiroyasu Fujimori and Yoshiyuki Kawazoe

17. Quantum Theory of the Longitudinal Josephson Plasma in High- $T_c$  Superconductors : QED in 1D Josephson Junction Array..... 407  
 J. Phys. Soc. Jpn., 68 (1999) pp.2010-2018  
 Tomio Koyama
  
18. Lattice Dynamics of Helium Gas Hydrates Based on Ice Framework:  
 Dynamic and Thermodynamic Stability..... 416  
 Solid State Commun., 109 (1999) pp.157-162  
 Rodion Vladimirovich Belosludov, Yoshiyuki Kawazoe,  
 Evgenie Vladimirovich Grachev, Yuri Alekseevich Dyadin  
 and Vladimir Romanovich Belosludov
  
19. Atomistic Theory of the Critical Field for Intrinsic Spin Reversal in  
 Transition Metals..... 422  
 Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.1028-1035  
 Lei Zhou, Yuichi Hashi, Qiang Sun, Jingzhi Yu, Dingsheng Wang  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
20. How to Simulate a Structural Phase Transition by the First-principles  
 Method? ..... 430  
 Phase Transitions, 67 (1999) pp.681-693  
 Krzysztof Parlinski, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
  
21. Electronic and Transport Properties of N-P Doped Nanotubes..... 443  
 Appl. Phys. Lett., 74 (1999) pp.79-81  
 Keivan Esfarjani, Amir Abass Farajian, Yuichi Hashi  
 and Yoshiyuki Kawazoe
  
22. A Simple Model for the Cyclic Amorphization Phenomenon..... 446  
 Acta Mater., 47 (1999) pp.475-480  
 Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe.
  
23. Finite Temperature Effects in a One-dimensional Mott-hubbard Insulator:  
 Angle-Resolved Photoemission Study of  $\text{Na}_{0.96}\text{V}_2\text{O}_5$ ..... 452  
 Phys. Rev. Lett., 82 (1999) pp.803-806  
 K. Kobayashi, T. Mizokawa, A. Fujimori, M. Isobe, Y. Ueda, T. Tohyama  
 and S. Maekawa

24. Simple Model for the Equation of State and Orientational Order –Disorder  
Transition of C<sub>60</sub> Solid under Pressure..... 456  
J. Phys. Soc. Jpn., 68 (1999) pp.508-514  
Orie Umiguchi, Takeshi Inaoka and Masayuki Hasegawa
25. Stable Vacancy Clusters in Neutron-Irradiated Graphite :  
Evidence for Aggregations with a Magic Number..... 463  
Phys. Rev. Lett., 82 (1999) pp.2532-2535  
Z. Tang, M. Hasegawa, T. Shimamura, Y. Nagai, T. Chiba, Y. Kawazoe,  
M. Takenaka, E. Kuramoto and T. Iwata
26. Geometry and electronic structure of magic iron oxide clusters..... 467  
Phys. Rev. B., 59 (1999) pp.12672-12677  
Q. Wang, Q. Sun, M. Sakurai, and J. Yu, B. L. Gu, K. Sumiyama and  
Y. Kawazoe

[2]. 国際会議発表

<1997年> (追加分)

1. Multimedia Database System KIND Featuring Amorphous Factual Database by Object-Oriented Method..... 473  
Computerization/Networking of Materials Databases (1997) pp.103-116  
Y. Kawazoe, K. Ohno, A.-P. Tsai, J. Z. Yu, T. Aihara, H. Mizuseki, M. Ishihara, M. Ikeda, M. Kojima, T. Nakanomyo, Y. Akiyama, T. Itoh, S. Wada and N. Mori
2. SCR Theory for the Superconducting Fluctuations in Layered d-wave Superconductors..... 487  
The 10th International Symposium on Superconductivity, Gifu (1997. 10) pp.269-272  
Tomio Koyama

<1998年>

1. How to Develop Fundamentally Few Collaboration between Japan and India in Materials Design by Computer Simulation..... 491  
India-Japan Joint Seminar on Computational Materials Science, (1998)  
Yoshiyuki Kawazoe
2. Ab-Initio Materials Design by Advanced Supercomputing Technology... 493  
The 5th IUMRS International Conference in Asia  
Bangalore, India (1998)  
Yoshiyuki Kawazoe
3. All-electron Full-potential Molecular Dynamics Simulation by Mixed-basis Approach..... 494  
Japan-Korea Joint Meeting on First-Principles Electronic Structure Calculations, Tsukuba, Japan (1998) p.25  
Yoshiyuki Kawazoe
4. Electronic Properties of Doped Nanotubes : Nano-Diodes..... 495  
CIMTEC'98 (1998) pp.107-112  
Keivan Esfarjani, Amir A. Farajian, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe

5. Ground State Structure of Silicon Clusters by Sa and Ga Methods..... 501  
 CIMTEC'98 (1998) pp.15-20  
 Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Kazuhito Shida and Yoshiyuki Kawazoe
  
6. How Accurate the First-Principles Calculations Can be Applied to  
 Nuclear Reactor Materials Research? ..... 507  
 4th International Conference on Computer Simulation of Radiation  
 Effects in Solids, Okayama (1998) p.I-4  
 Yoshiyuki Kawazoe
  
7. First-Principle Determination of the Soft Mode in Cubic  $ZrO_2$  and  $SrTiO_3$ • 508  
 CALPHAD X XVII, Beijing (1998) p.13  
 Yoshiyuki Kawazoe, Zhi-Qiang Li and K. Parlinski
  
8. A Thermodynamic Model for Solubility of Hydrogen in Clusters..... 509  
 CALPHAD X XVII, Beijing (1998) p.15  
 Q. Sun, J. Z. Yu and Y. Kawazoe
  
9. Theoretical Study of Hydrogen Solubility in Magnetic Alloys..... 510  
 CALPHAD X XVII, Beijing (1998) p.19  
 Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Zhi-Qiang Li, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
  
10. Transport Properties of Doped Carbon Nanotubes..... 511  
 Advanced Materials-4 Proc. Special Symposium on Advanced Materials,  
 Nagoya (1998. 5) pp.15-18  
 Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
  
11. A Classification of the Role of Impurities at Inter-Phase Boundaries..... 515  
 Advanced Materials-4 Proc. Special Symposium on Advanced Materials,  
 Nagoya (1998. 5) pp.369-372  
 Marcel Sluiter, Hai-Ping Wang and Yoshiyuki Kawazoe
  
12. Structure and Magnetism of Small Fe Clusters..... 519  
 ISPM'98, Sendai (1998. 8) p.82  
 A. Taneda, K. Esfarjani, M. Sakurai, K. Sumiyama and Y. Kawazoe



13. Quantum Method for Calculating the Coercivity of Transitional Magnetic Material..... 519  
ISPMM'98, Sendai (1998. 8) p.68  
Lei Zhou, Qiang Sun, Jian-Tao Wang, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
14. First-principles Calculation of the Structural and Magnetic Properties of (Cr, Mn, Fe) / Ag Monatomic Multilayers..... 519  
ISPMM'98, Sendai (1998. 8) p.166  
Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
15. Numerical Simulation of Melting Sample in Shear Cell under Microgravity..... 520  
32nd COSPAR Scientific Assembly, Nagoya (1998. 7)  
Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, K. Higashino and Y. Kawazoe

< 1999 年 >

1. Cluster Growth in Cluster Beam Deposition Process by Direct Simulation Monte Carlo..... 521  
MORIS'99, USA (1999. 1) pp.44-45  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
2. Multi-valued Magnetic Recording Scheme by Self-organized Magnetization Dynamics..... 523  
INTERMAG 99, Korea (1999. 5) p.FQ-14  
M. Ishihara, H. Mizuseki, K. Ohno and Y. Kawazoe
3. First-principles Study of the Exchange Interactions in BCC-Fe/Au(001) Multilayers..... 525  
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing (1999. 6) pp.607-608  
Jiantao Wang, Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe and Dingsheng Wang
4. Study of an Electrochemical Deposition Process by Computer Simulation Based on Multiparticle Diffusive Aggregation..... 525  
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing (1999. 6) p.614  
Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe

5. Segregation Effects at Coherent Interfaces with Application to Ni<sub>3</sub>Al with Ti Additions..... 526  
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing (1999. 6) pp.614-615  
Hai-Ping Wang, Marcel Suliter and Yoshiyuki Kawazoe
  
6. How Well Physical, Chemical, and Mechanical Properties of Materials Can be Predicted by *Ab Initio* Techniques..... 526  
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing (1999. 6) pp.607-608  
Y. Kawazoe
  
7. Multiscale Simulation for Cluster Growth and Deposition Processes by Adiabatic Expansion of Metal Vapor..... 527  
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing (1999. 6) pp.607-608  
Hiroshi Mizuseki, Ying Jin and Yoshiyuki Kawazoe
  
8. Factual Materials Database for Non-equilibrium and Metastable Phases... 527  
CODATA '99 DSAO, Tsukuba (1999. 7) p.36  
Jing-Zhi Yu, Toshiyuki Ito, Youko Akiyama and Yoshiyuki Kawazoe
  
9. How *Ab Initio* Computer Simulation can Predict Materials Properties before Experiment..... 528  
IPMM '99, Honolulu (1999. 7) pp.355-359  
Yoshiyuki Kawazoe

[3]. 紀要等

1. 経理情報照会システムの構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 533  
技術研究報告 第 18 号 (1999) pp.93-98  
伊藤敏行、秋山庸子、和田繁男、佐藤和弘、中名生充、布田博、須田仁、  
斎藤加代子、川添良幸
2. 技術部各種実績報告システムの構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 539  
技術部研究報告 第 18 号 (1999) pp.99-104  
伊藤敏行、佐藤和弘、和田繁男、中名生充、松木邦美、本郷健一、  
川添良幸
3. ISDN 回線を使用した遠隔テレビ会議支援・・・・・・・・・・・・・・ 545  
－教授会、遠隔授業および国際授業交流－  
技術部研究報告 第 18 号 (1999) pp.105-112  
中名生充、佐藤和弘、一関京子、秋山庸子、小無健司、松井秀樹、  
川添良幸
4. メールサーバの移行およびWSのメール環境整備・・・・・・・・・・・・ 553  
技術部研究報告 第 18 号 (1999) pp.113-122  
一関京子、佐藤和弘、和田繁男、橋川光一
5. 快適な情報通信環境の整備を目指して－imr21 ネットワークの構築－・・・ 562  
技術部研究報告 第 18 号 (1999) pp.123-127  
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
6. 実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究・・・・・・・・ 567  
IMR ニュース No.31 (1999) pp.40-44  
川添良幸

#### IV. 予稿集

##### <1997年> (追加分)

1. 混合基底第一原理分子動力学法によるフラーレンの動的挙動の詳細シミュレーション..... 573  
第2回高精度分子設計研究会公開シンポジウム (1997) pp.90-92  
川添良幸
2. 第一原理分子動力学法によるマイクロクラスターの動的挙動に関するシミュレーション..... 576  
第2回高精度分子設計研究会公開シンポジウム (1997) pp.93-98  
大野かおる
3. 二次元  $t-t'-t''-J$  模型の励起スペクトルと相分離..... 582  
日本物理学会秋の分科会講演概要集、(1997) p.672  
遠山貴己、前川禎通

##### <1998年>

1. Ab Initio Magneto-optics of MnAg, FeAg, FeAu and FeRh Multilayers... 583  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.49  
E. Kulatov, Y. Kawazoe, Yu. Uspenski and S. Halilov
2. 第一原理計算による磁気多層膜の持つ特異な磁性の研究..... 583  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.50  
王 建涛、李 志強、周 磊、大野かおる、王 鼎盛、川添良幸
3. Coercivities of Small Magnetic Microclusters..... 584  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.51  
Lei Zhou, Jing-Zhi Yu, Ding-Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
4. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデル(モンテカルロ法、クラスター変分法)による相転移の研究..... 584  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.55  
佐原亮二、市川 浩、水関博志、M. Sluiter、大野かおる、川添良幸

5. Force Constants for Substitutional Alloys..... 585  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.52  
M. Sluiter and Y. Kawazoe
6. Behavior of Ti Impurity at (111) Anti-phase Boundaries in Ni<sub>3</sub>Al..... 585  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.52  
H.-P. Wang, M. Sluiter and Y. Kawazoe
7. ハイブリッドモデルによる結晶成長のシミュレーション研究..... 586  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.58  
水関博志、川添良幸
8. 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2..... 587  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.242  
市川 浩、佐原亮二、水関博志、大野かおる、篠原 猛、川添良幸
9. 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 II ..... 587  
日本金属学会春期大会講演概要 (1998) p.310  
種田晃人、川添良幸
10. Computational Approach to the Understanding of the Linear and Nonlinear  
Properties of Practical Nonlinear Optical Crystals..... 588  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.316  
Ding-Sheng Wang
11. Local field と周波数に依存する誘電率の計算..... 588  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.316  
石井 聡、大野かおる、川添良幸
12. 第一原理計算による Fe/Cu 多層膜の持つ特異な磁性の研究..... 588  
日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.326  
王 建涛、李 志強、周 磊、王 鼎盛、川添良幸

13. Planar Vacancy-Clusters of Six-Membered Ring in Neutron-Irradiated Graphite..... 589  
 日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.387  
 Z. Tang, T. Simamura, M. Hasegawa, Y. Nagai, Y. Kawazoe,  
 T. Chiba, M. Takenaka, E. Kuramoto and T. Iwata
14. 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ルティ・ 589  
 日本金属学会秋期大会講演概要 (1998) p.387  
 佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
15. Ab Initio Molecular Dynamics Calculations of Collision and Encapsulation of Another Atom to C<sub>60</sub>..... 590  
 第 15 回フラーレン総合シンポジウム, 松島 (1998.7) p.10  
 Kaoru Ohno
16. Ab-Initio Study of Dopant Insertion in Carbon Nanotubes..... 593  
 第 15 回フラーレン総合シンポジウム, 松島 (1998.7) p.288  
 Amir A. Farajian, Kaoru Ohno, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
17. Energetics of Defects and Mechanical Properties of Deformed Nanotubes・ 594  
 第 15 回フラーレン総合シンポジウム, 松島 (1998.7) p.289  
 Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
18. スーパーコンピューターによる材料設計の可能性..... 595  
 東北大学金属材料研究所 98 年度企画講演会  
 -材料科学技術の新しい道を探る- (1998.10) p.5  
 川添良幸
19. First-principles Molecular-dynamics Simulations on the Proton Diffusion in SrTiO<sub>3</sub>..... 596  
 固体イオニクス 重点領域研究成果最終報告会 (1998.10) pp.151-153  
 Yoshiyuki Kawazoe
20. C<sub>120</sub> Bucky Peanuts : FT-MS and FT-IR Spectral Evidence..... 599  
 超微粒子とクラスター懇談会第2回研究会 (1998) pp.115-117  
 J. Onoe, Y. Hashi, K. Esfarjani, Y. Kawazoe and K. Takeuchi

21. Nanotube Diodes..... 602  
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
22. First-Principles Study for the Adsorptions of O Adatom on  
Hydrogenated Si Cluster..... 606  
超微粒子とクラスター懇談会第2回研究会 (1998) pp.161-163  
Q. Sun, K. Ohno and Y. Kawazoe
23. フラーレンへの内包過程における電子状態と第一原理分子動力学  
シミュレーション..... 609  
TOHOKU LNS Report (1998) pp.143-150  
大野かおる、志賀圭一郎、丸山 豊、川添良幸
24. Ni 酸化物の励起スペクトル..... 617  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.658  
筒井健二、小椎八重航、石原純夫、前川禎通
25. 微小 2 重トンネル接合のスピンの依存伝導..... 618  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.631  
今村裕志、高橋三郎、前川禎通
26. 二重交換模型における"Flux" state..... 619  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.693  
山中雅則、小椎八重航、前川禎通
27. ドープした 1 次元 Ni 酸化物  $Y_{2-x}Ca_xBaNiO_5$  における不整合磁気状態... 620  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.693  
小椎八重航、山中雅則、押川正毅、前川禎通

28. 銅酸化物における超交換相互作用..... 621  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.688  
水野義明、遠山貴己、前川禎通
29. 二本足梯子格子の一粒子励起スペクトル..... 622  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.688  
遠山貴己、前川禎通
30. Mn 酸化物における軌道の自由度と相分離 II ..... 623  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.662  
岡本敏史、石原純夫、前川禎通
31. TMR に対する電子状態の効果..... 624  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.550  
伊藤博介、池田 充、井上順一郎
32. TMR に対する不純物および非平衡電流の効果..... 625  
日本物理学会講演概要集 第 53 卷 第 1 号, 東京 (1998. 3) p.426  
野々山信二、伊藤博介、小栗 章、井上順一郎、P. Bruno
33. SA and GA Simulations of Silicon Clusters..... 626  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.158  
K. Esfarjani, Y. Hashi, K. Shida and Y. Kawazoe
34. Electronic Transport Through Ga / As Quantum Wire..... 627  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 卷 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.161  
A. A. Farajian, K. Esfarjani, T. Hashizume and Y. Kawazoe



35. 欠陥を含むカーボンナノチューブの力学特性..... 628  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.287  
橋 祐一、Keivan Esfarjani、川添良幸
36. Transport in Doped Carbon Nanotubes..... 629  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.288  
K. Esfarjani, A. A. Farajian, Y. Hashi and Y. Kawazoe
37. Ab-Initio Study of Na insertion into Carbon Nanotubes..... 630  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.288  
A. A. Farajian, K. Ohno, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
38. Si(100)2×1-H 上に作製したダングリングボンド構造のパイエルス変形... 631  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.355  
一杉太郎、橋詰富博、平家誠嗣、小野木敏之、渡邊聡、長谷川哲也、  
北沢宏一、Z. -Q. Li、大野かおる、川添良幸
39. Nonmagnetism of 5d Monolayers on Ferromagnetic Substrate..... 632  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号  
沖縄 (1998. 9) p.492  
Q. Sun, J. Z. Yu, K. Ohno and Y. Kawazoe
40. 分子動力学法による m-n レナードジョーンズ粒子系  
固相-固相相転移現象の解析..... 633  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.830  
三田成志、長谷川正之、大野かおる、相原智康、川添良幸
41. シータ溶媒中の星形ポリマー..... 634  
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 53 巻 第 2 号, 沖縄  
(1998. 9) p.850  
志田和人、大野かおる、川添良幸

42. 共晶体の組織形成の環境依存性の研究..... 635  
金研ワークショップ  
「次世代機能素子用基盤としての単結晶の作成と評価」  
(1998. 8)  
水関博志、川添良幸

<1999 年>

1. 第一原理計算による Fe/Au 多層膜の持つ特異な磁性の研究..... 636  
日本金属学会春季大会講演概要 (1999) p.308  
王建涛、周磊、王鼎盛、川添良幸
2. アモルファス合金の微視的変形機構とガラス遷移..... 636  
日本金属学会春季大会講演概要 (1999) p.50  
相原智康、川添良幸
3. Positron Annihilation Study of Vacancies in Diamond..... 637  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.111  
Z. Tang, M. Hasegawa, T. Chiba, T. Shimamura, Y. Nagai, M. Saito,  
H. Sumiya and Y. Kawazoe
4. Development of a New Transferable Classical Potential for Semiconductors  
and Metals..... 638  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.141  
Keivan Esfarjani, M. H. F. Sluiter, A. A. Farajian and Y. Kawazoe
5. Mean-field Treatment of Interaction Effects in Transport through Doped  
Nanotube  
Junctions..... 639  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.169  
Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

6. GaTe における励起子のエネルギー分裂..... 640  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.230  
東海林篤、山本愛士、後藤武生、Erkin Kulatov、大野かおる、  
川添良幸、内田和人、三浦登
7. 陽電子親和性微小析出物の検出—Fe-Cu モデル合金—..... 641  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.107  
永井康介、長谷川雅幸、A. Hempel、唐政、島村健男、河合昭雄、  
鹿野文寿、中東重雄
8. 陽電子消滅同時計数ドップラーブロードニング測定法による Si 中の  
原子空孔の化学分析..... 642  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.112  
長谷川雅幸、野中剛、永井康介、唐政、竹中稔、蔵元英一
9.  $K_xC_{60}$  薄膜の光重合:FT-MS および FT-IR による検討..... 643  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.238  
尾上順、橋祐一、Keivan Esfarjani、川添良幸、武内一夫
10.  $C_{59}As$  の第一原理分子動力学計算..... 644  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.300  
大野かおる、志賀圭一郎、川添良幸、丸山豊、大槻勤
11. The Similarity in Adsorption between Hydrogenated Si Cluster and  
H-terminated Si Surface..... 645  
日本物理学会春期講演概要集 第 54 回 第 1 号, 広島 (1999. 3)  
p.300  
Q. Sun, Q. Wang, J. Z. Yu, M. Ishihara and Y. Kawazoe
12. 大規模ヒト脳画像データベースにおけるマスメモリーの高速化..... 646  
電子情報通信学会 99 年大会 (1999) p.1  
志田和人、川添良幸、桑川一也、川島隆太、大槻昌夫、福田寛

13. 金属マイクロクラスターの超高密度磁気記録材料への応用研究…………… 647  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.121  
村上純一、吉村和記、多井 豊、丸山豊、五十嵐一男、  
川添良幸、大野かおる、水関博志、石原正仁
14. 実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究  
—実験的アプローチ…………… 648  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.122  
川添良幸、大野かおる、近藤保、寺寄亨、安松久登、市橋正彦
15. クラスタ内包フラーレンの構造と物性…………… 649  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.178  
奥健夫、川添良幸、Q. Sun、D. S. Wang、Q. Wang
16. フラーレン光重合ポリマーの構造に関する研究…………… 650  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) pp.244-245  
尾上順、武内一夫、橋祐一、Keivan Esfarjani、大野かおる、川添良幸
17. 相転移の理論的およびシミュレーションによる研究…………… 652  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) pp.293-294  
長谷川正之、大野かおる
18. 低次元物質のエネルギーバンド計算…………… 654  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) pp.295-296  
川添良幸、大野かおる、R. Belosullov、吉成武久、高橋良雄、  
長坂慎一郎、大西彰正、桧和田亨
19. 超臨界状態の第一原理分子動力学計算…………… 656  
平成 10 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.297  
池庄司民夫、劉子敬、川添良幸

20. C<sub>60</sub>分子の半導体表面上への吸着過程の分子動力学シミュレーション・・・ 657  
平成10年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.298  
川添良幸、櫻井利夫、大野かおる、神山 博、薛 其
21. 平成10年度金研ワークショップ  
実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究報告書…………… 658  
平成10年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) pp.342-347  
川添良幸、大野かおる
22. 半導体ダイヤモンド薄膜の合成と光物性に関する研究…………… 664  
平成10年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) pp.11-12  
関口隆史、大串秀世、竹内大輔、渡辺幸志
23. 金属フタロシアニンセンサ機能薄膜のFI-STM観察…………… 666  
平成10年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告  
(1999. 6) p.215  
長谷川幸雄、櫻井利夫、大場康之、村上健司
24. スーパーコンピューター中の新素材創製…………… 667  
東北大学金属材料研究所第97回春季講演会 (1999. 6) p.7  
川添良幸
25. First-Principles Studies on Pd Intercalated Graphite…………… 668  
東北大学金属材料研究所第97回春季講演会 (1999. 6) p.23  
Q. Sun, Q. Wang, D. S. Wang, T. Oku, Z. J. Yu and Y. Kawazoe
26. 遷移金属クラスターの安定構造…………… 669  
東北大学金属材料研究所第97回春季講演会 (1999. 6) p.24  
種田晃人、川添良幸
27. GW近似に基づくNaクラスターの準粒子エネルギーの計算…………… 670  
東北大学金属材料研究所第97回春季講演会 (1999. 6) p.25  
石井聡、大野かおる、川添良幸

28. Theoretical Determination of the Exchange Coupling Strengths for Fe/Au Multilayers..... 671  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.26  
 Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
29. First-Principles Studies on Magnetism of Ni clusters Coated with Pd and Ni-Pd Alloyed Clusters..... 672  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.27  
 Q. Wang, Q. Sun, J-Z. Yu, Y. Hashi and Y. Kawazoe
30. Orbital Correlation Effects in Transition Metal Microclusters..... 673  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.28  
 Lei Zhou, Jian-Tao Wang, Dingsheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
31. Simulation of Cluster Formation Process in Rarefied Gas by DSMC Method..... 674  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.29  
 Ying Jin, Hiroshi Mizuseki, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
32. Thermocapillary Flow in Half-zone Liquid Bridges..... 675  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.30  
 Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, K. Higashino and Y. Kawazoe
33. 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弱いユニバーサリティ..... 676  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.31  
 佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
34. Relaxation and Charge Transfer in Ga and As Dimers on Si(100) surface... 677  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.32  
 Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
35. 金属学会会報データベースの公開..... 678  
 東北大学金属材料研究所第 97 回春季講演会 (1999. 6) p.56  
 川添良幸、余京智、伊藤敏行、秋山庸子、谷口至良、山村力

36. 電荷移動を考慮した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..... 679  
超微粒子とクラスター懇談会第3回研究会 (1999) pp.59-62  
種田晃人, 川添良幸
37. 反応性レーザー蒸発クラスター源で得られる安定酸化物クラスターと  
その構造..... 683  
超微粒子とクラスター懇談会第3回研究会 (1999) pp.87-90  
櫻井雅樹, 孫強, 隅山兼治, 川添良幸
38. The Renormalized Interaction Method: a New Order-N Algorithm..... 687  
超微粒子とクラスター懇談会第3回研究会(1999) pp.169-171  
Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
39. Optimized Geometries and Charge Transfer in Ga and As Dimers on Si  
Surface..... 690  
超微粒子とクラスター懇談会第3回研究会(1999) pp.115-117  
Amir Abbas Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

## V. 研究会等

1. 『実験と計算科学的アプローチの共同によるナノ物質研究』  
金研ワークショップ (1998.10)  
代表者 川添良幸
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 (1998.4,10)  
発起人・世話人 川添良幸
3. 『半導体エピタキシャル成長の原始レベル制御に関する研究』  
東北大学電気通信研究所・共同プロジェクト研究会 (1998.10)  
大野かおる

## VI. 受賞記事

1. 1. 科学技術庁長官賞

『材料設計シミュレーションプログラム管理支援用ツール群の改  
善』..... 693

秋山庸子 (1999.4.12)

## VII. 新聞記事

1. 『産学共同推進懇話会  
-材料科学技術の新しい道を探る-』..... 694  
日刊工業新聞 (1998.10.26)
2. 『シリコン表面の未結合手細線の電荷移動確認』..... 695  
日刊工業新聞 (1999.1.12)



3. 『新概念のコンピューター構想 -細胞使い素子-』…………… 696  
河北新報 (1999.5.15)
4. 『ホヤの遺伝子解明へ』…………… 697  
日刊工業新聞 (1999.6.9)
5. 『炭素繊維がダイオードに』…………… 698  
河北新報 (1999.7.1)

## VIII. 出版

1. 『自然科学とコンピュータ』  
神山 博、川添良幸  
共立出版 (1999)
2. 『Mesoscopic Dynamics of Fracture』  
H. Kitagawa, T. Aihara Jr and Yoshiyuki Kawazoe  
Springer (1998)

## IX. 雑誌掲載解説記事

1. 『第一原理計算の限界と将来展望』…………… 699  
川添良幸  
まてりあ 第37巻 第7号 (1998) pp.583-585
2. 『新米国スーパーコンピュータプロジェクト』…………… 702  
川添良幸  
bit 12月号 (1998) pp.2-9
3. 『多部門多目的データバンク構築のための基礎的研究』…………… 710  
金属材料研究所ネットワーク代表者 川添良幸  
東北大学学報 第1471号別冊 (1998) p.11

4. 『もの作りの技術と私との思ったより近い関係』…………… 711  
川添良幸  
IMR 技術部ニュース 第 14 号 (1998) pp.1-2
5. 『東北の豊かな暮らしのために』…………… 713  
金属材料研究所スーパーコンピュータ  
日立製作所パンフレット
6. 『第一原理計算手法による材料物性研究』ミニ特集の企画に当たって… 714  
まてりあ 第 37 巻 第 7 号 (1998) p.559  
大野かおる
7. 『全電子混合基底法による金属半導体超微粒子の第一原理計算』…………… 715  
まてりあ 第 37 巻 第 7 号 (1998) pp.573-577  
丸山豊、大野かおる
8. 『遺伝的アルゴリズム』…………… 720  
まてりあ 第 37 巻 第 10 号 (1998) pp.893-893  
Keivan Esfarjani、志田和人、大野かおる、川添良幸
9. 『オンラインジャーナル』…………… 721  
まてりあ 第 38 巻 第 1 号 (1999) pp.15-17  
水関博志
10. 『第一原理計算からの材料強度評価の可能性』…………… 724  
材料(J. Soc. Mat. Sci., Japan) 47 (1998) pp.1099-1105  
川添良幸、相原智康
11. 『Cathodoluminescence Imaging of Dislocations in Silicon  
- on the Origin of D1 and D2 Lines』…………… 731  
Semiconductor News (1998) pp.121-123  
T. Sekiguchi
12. 『平成 9 年東北大学の動向(1)研究成果』…………… 734  
東北大学学報 第 1455 号 (1998) pp.12-13  
川添良幸教授、ケイワン・エスファルジャーニ寄附研究部門教員

13. 『材料設計研究部における最近の研究』…………… 735  
 第5回新素材設計開発施設ニュース (1998) pp.6-8  
 Marcel H. F. Sluiter、水関博志
14. 『贈言』…………… 738  
 超微粒及其聚集体 (1998 )  
 川添良幸
15. 『材料科学の国際的な研究拠点として積極的に外国人研究者受け入れ』・740  
 東北インテリジェント・コスモス構想推進協議会ニュース Vol.26  
 (1998) pp.8-9

X. 書籍

1. Molecular Dynamics Simulation of Tensile Deformation in Amorphous  
 $Zr_{67}Ni_{33}$  Alloy…………… 742  
 Mesoscopic Dynamics of Fracture (1998) pp.76-87  
 Tomoyasu Aihara, Jr. and Yoshiyuki Kawazoe
2. Program Tuning for Large-Scale Simulations in computational Materials  
 Science…………… 754  
 Advances in Materials Research, 1 (1998), pp.239-248  
 Hiroshi Mizuseki, Ryoji Sahara, Zhi-Qiang Li, Kaoru Ohno  
 and Yoshiyuki Kawazoe
3. An All-Electron First-Principles Molecular Dynamics Method and a  
 Possibility of its Application to Atomistically Distorted Systems…………… 764  
 Advances in Materials Research, 1 (1998), pp.210-219  
 Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama, Hiroshi Kamiyama, Eizo Bei,  
 Keiichiro Shiga, Zhi-Qiang Li, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

## XI. 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・・・・・・・・・・・・ 774
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・・・・・・・・ 775
3. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 776
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 777