

1999 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

(1999 年 4 月～2000 年 3 月)

目次

- I. はじめに
- II. 研究内容概要
 1. 水素貯蔵合金中の格子間水素のシミュレーション…………… 1
東北大学金属材料研究所 相原智康、川添良幸
 2. Effects of Orbital Correlation to Transition Metal Systems…………… 3
Institute for Materials Research, Tohoku University Lei Zhou,
Jian-Tao Wang, Dingsheng Wang and Y. Kawazoe
 3. タイトバインディング分子動力学法による 3d 遷移金属クラスターの
構造安定性…………… 5
東北大学金属材料研究所 種田晃人、川添良幸
 4. 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…………… 7
東北大学金属材料研究所 王建涛、周磊、川添良幸
中国科学院物理研究所 王鼎盛
 5. 第一原理によるカルシウムの fcc, bcc 両相における振動励起及び
その相平衡への効果に関する研究…………… 9
東北大学金属材料研究所 川合史章、Marcel H. F. Sluiter、川添良幸
 6. 全電子混合基底法プログラムの最適化…………… 10
東北大学金属材料研究所 大野かおる、Keivan Esfarjani、Marcel Sluiter、
川添良幸
日立東北ソフトウェア(株) 安達斉、橋祐一
名古屋工業技術研究所 丸山豊

7. 格子モデルシミュレーションによる相転移の統計力学的諸特性…………… 15
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、水関博志、M. Sluiter、大野かおる
川添良幸
8. フラレンへの異種原子挿入過程の第一原理分子動力学
シミュレーション…………… 18
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
東北大学理学研究科 原子核理学研究施設 大槻勤
9. 多様な枝分かれ形態をもつ高分子の溶液中での物性シミュレーション… 19
東北大学金属材料研究所 志田和人、大野かおる、川添良幸
10. 強い原子衝突における第一原理分子動力学に対する
全電子混合基底法の応用…………… 21
東北大学金属材料研究所 大野かおる、森里嗣生、石井聡、志賀圭一郎
Keivan Esfarjani、Marcel Sluiter、川添良幸
日立東北ソフトウェア 安達斉、橋祐一
青森公立大学 神山博
通産省工業技術院名古屋工業技術研究所 丸山豊
ステーシー分子科学研究所 李志強
11. モンテカルロ直説法によるクラスター成長のシミュレーション研究…………… 22
東北大学金属材料研究所 水関博志、Jin Ying、川添良幸
12. 第一原理計算によるCとNから成る結晶における
N原子1s軌道エネルギーの構造依存性に関する研究…………… 25
東北大学金属材料研究所 森里嗣生、大野かおる、川添良幸
13. First-Principles Calculations for Coincidence Doppler Broadening of
Positron Annihilation Radiation…………… 26
Institute for Materials Research, Tohoku University Z. Tang, M. Hasegawa,
Y. Nagai and Y. Kawazoe

14. Thermocapillary Convection in the Model of Floating Zone Crystal Growth under Microgravity..... 28
 Institute for Materials Research, Tohoku University Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe
 Ishikawajima-Harima Heavy Industries Co., Ltd K. Higashino
15. モンテカルロ直接法の MPI による高速化..... 30
 東北大学金属材料研究所 水関博志、一関京子、川添良幸
 Florida Atlantic University, Department of Physics Luc T. Wille
16. 全電子第一原理計算による C_3N_4 結晶の構造予測..... 32
 東北大学金属材料研究所 森里嗣生、大野かおる、川添良幸
 東北大学科学計測研究所 楠勲
17. First-principles Studies on Oxide Clusters..... 34
 Institute for Materials Research, Tohoku University Q. Sun, Q. Wang, J.-Z. Yu and Y. Kawazoe
18. Toward an Easy to Use, Fast All-electron Full-potential Electronic Structure Code..... 36
 Institute for Materials Research, Tohoku University Marcel Sluiter、郭永、吳健、孫強、王前、Vijay Kumar、Keivan Esfarjani、Siu Tat Chui、石井聡、石井貴文、Sornthep Vannarat
 大阪大学産業科学研究所 奥健夫
 東北大学工学部 Rodion Belosludov
19. First-principles Studies on Clusters..... 43
 Institute for Materials Research, Tohoku University Q. Wang, Q. Sun, J.-Z. Yu and Y. Kawazoe
20. Phase Segregation in Fermion Droplets..... 44
 Institute for Materials Research, Tohoku University K. Esfarjani, V. Kumar and Y. Kawazoe
 Bartol Research Institute, University of Delaware Siu Tat Chui

21. Strain Induced Alloying in Semiconductor Heterostructures..... 45
Institute for Materials Research, Tohoku University S. Vannarat,
Marcel H. F. Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
22. Electronic and Atomic Structure of Clusters..... 47
Institute for Materials Research, Tohoku University Vijay Kumar
and Yoshiyuki Kawazoe
23. 全電子混合基底法による GW 近似のナトリウムクラスターへの適用..... 48
東北大学金属材料研究所 石井聡、大野かおる、川添良幸
24. 共役勾配法を用いた全電子混合基底法による金属クラスターの
構造最適化計算..... 50
東北大学金属材料研究所 E. Bei, K. Esfarjani, M. Sluiter, K. Ohno
and Y. Kawazoe
25. Thermodynamic Modeling of Hydrogen Solubility in Fe, Co and Ni..... 52
Institute for Materials Research, Tohoku University Jing-Zhi Yu, Qiang Sun,
Qian Wang and Yoshiyuki Kawazoe
26. GW クラスター計算における非対角要素の重要性..... 53
東北大学金属材料研究所 大野かおる
カリフォルニア大学バークレー校物理学科 Steven G. Louie
27. ニッケル酸化物の電子状態..... 54
東北大学金属材料研究所 小椎八重航、筒井健二、前川禎通
28. 強磁性体／超伝導体／強磁性体-トンネル接合におけるスピン注入と
超伝導抑制..... 56
東北大学金属材料研究所 高橋三郎、今村裕志、前川禎通
29. 厳密対角化法による t - J 模型の励起スペクトルの研究..... 57
東北大学金属材料研究所 遠山貴巳、前川禎通
30. マンガン酸化物における軌道の自由度と相転移..... 59
東北大学金属材料研究所 岡本敏史、石原純夫、前川禎通

31. 銅酸化物高温超伝導体における共鳴非弾性 X 線散乱のドーピング依存性..... 61
東北大学金属材料研究所 近藤浩、筒井健二、遠山貴巳、前川禎通
32. 準結晶・アモルファス・液体金属の動的性質と電子状態..... 63
中央大学理工学部 石井靖
東北大学金属材料研究所 柴田薫
33. 銅酸化物における電荷ストライプ秩序と磁氣的性質..... 64
東北大学金属材料研究所 柴田康雅、遠山貴巳、前川禎通
34. 分子動力学法の格子欠陥への応用..... 66
岩手大学人文社会科学部 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
35. 2次元 t - J モデルにおける非磁性不純物効果..... 68
岩手大学工学部 小田島聡
東北大学金属材料研究所 小山富男
36. 高温超伝導体固有ジョセフソン接合列におけるジョセフソン効果とプラズマ振動..... 69
東北大学金属材料研究所 小山富男
37. 銅酸化物絶縁体の共鳴非弾性 X 線散乱スペクトル..... 71
東北大学金属材料研究所 筒井健二、遠山貴巳、前川禎通
38. 銅酸化物高温超伝導体の非磁性不純物効果とストライプ..... 73
東北大学金属材料研究所 高橋亮、遠山貴巳、前川禎通
39. 1次元モット絶縁体の非線形光学応答とスピン・電荷分離..... 74
東北大学金属材料研究所 水野義明、筒井健二、遠山貴巳、前川禎通
40. マンガン酸化物における共鳴 X 線散乱の一般論..... 76
東北大学金属材料研究所 石原純夫、前川禎通

41. 2次元ハバードモデルの電子状態とフェルミ面..... 78
サレルノ大学 物理科学科 西川泰一郎
東北大学金属材料研究所 小山富男
42. 固相-液相転移に対する計算機実験の限界..... 79
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

III. 論文リスト

[1]. 原著論文

<1998 年> (追加分)

1. Theories on Critical Phenomena at Surfaces..... 81
Trends in Statistical Physics, 2 (1998) pp.97-130
Kaoru Ohno
2. Resonance Splitting Effect in Semiconductor Superlattices..... 115
Eur. Phys. J. B, 3 (1998) pp.257-261
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Zhi-Qiang Li, Qiang Sun
and Yoshiyuki Kawazoe
3. Transmission Resonances in Magnetic-Barrier Structures..... 120
Eur. Phys. J. B, 3 (1998) pp.263-270
Yong Guo, Zhi-Qiang Li, Bing-Lin Gu, Qiang Sun, Jing-Zhi Yu
and Yoshiyuki Kawazoe

<1999 年>

1. Direct Numerical Simulation of Oscillatory Marangoni Convection in
Cylindrical Liquid Bridges..... 128
J. Cryst. Growth, 204 (1999) pp.395-404
Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kazuyuki Higashino and Yoshiyuki Kawazoe
2. How Accurate the First-Principles Calculations can be Applied to Nuclear
Reactor Materials Research?..... 138
Beam Interactions with Materials & Atoms, 153 (1999) pp.77-86
Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Hiroshi Kamiyama,
Zheng Tang, Masayuki Hasegawa and Hideki Matsui
3. *Ab Initio* HF, MP2 and DFT Studies of the Structures, Vibrations
and Energetics of the Urea Dimer and Trimer..... 148
Molecular Engineering, 8 (1999) pp.105-119
Vladimirovich Rodion Belosludov, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe

4. Numerical Simulation of Oscillatory Thermocapillary Convection in Liquid Bridge..... 163
 SPIE Materials Research in Low Gravity II, 3792 (1999) pp.353-362
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kazuyuki Higashino
 and Yoshiyuki Kawazoe

5. Body-Centered-Cubic Lattice Model with Many-Body Interactions Representing the Melting Transition in Si..... 173
 J. Chem. Phys., 110[19] (1999) pp.9608-9617
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno, Satoshi Uda,
 Tsuguo Fukuda and Yoshiyuki Kawazoe

6. First-Principles Studies on the Adsorptive Properties of Hydrogenated Si Cluster..... 183
 Physica B, 269 (1999) pp.239-243
 Qian Wang, Qiang Sun, Jing-Zhi Yu, Masahito Ishihara
 and Yoshiyuki Kawazoe

7. The Study on Transmission Properties of Carbon Nanotubes by Recursive Green's Function Method..... 188
 Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.,24[2] (1999) pp.205-208
 Bing-Lin Gu, Jian Wu, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

8. First-Principles Determination of Possible Geometries in Cis-Polyacetylene..... 192
 Synth. Met., 101 (1999) pp.507-508
 Chang-Qin Wu and Yoshiyuki Kawazoe

9. Vibrational Analysis of a *Trans*-Polyacetylene Chain..... 194
 Synth. Met., 101 (1999) pp.314-315
 Jian Miao, Chang-Qin Wu, Xin Sun, Rong-Tang Fu, Zhi-Qiang Li
 and Yoshiyuki Kawazoe

10. Zero-Point Motions in Charged C₆₀..... 196
 Synth. Met., 103 (1999) pp.2452-2453
 Xiao-Dong Wang, Rong-Tang Fu, Xin Sun and Yoshiyuki Kawazoe

11. Can Ab Initio Simulation Really Predict Properties of Materials
Prior to Experimental? 198
Bull. Mater. Sci., 22[5] (1999) pp.901-904
Yoshiyuki Kawazoe

12. Ab *Initio* Studies on the Structural and Magnetic Properties of
FeCu Superlattices 202
Phys. Rev. B, 60[5] (1999) pp.3025-3028
Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe

13. Nonlinear Coherent Transport Through Doped Nanotube Junctions 206
Phys. Rev. Lett., 82[25] (1999) pp.5084-5087
Amir Abbas Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

14. Localized Basis Set Optimization 210
Comp. Mater. Sci., 15 (1999) pp.351-356
Keivan Esfarjani, Amir Abbas Farajian and Yoshiyuki Kawazoe

15. Formation of As- and Ge-doped Heterofullerenes 216
Phys. Rev. B., 60[3] (1999) pp.1531-1534
Tsutomu Ohtsuki, Kaoru Ohno, Keiichiro Shiga, Yoshiyuki Kawazoe,
Yutaka Maruyama and Kazuyoshi Masumoto

16. Monte Carlo Simulation of Cu-Au Alloys on FCC Lattice with a
Renormalized Potential 220
Mater. Trans. JIM, 40[9] (1999) pp.911-914
Hiroshi Ichikawa, Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno
and Yoshiyuki Kawazoe

17. Theoretical Study of Hydrogen Solubility in Fe, Co and Ni 224
Mater. Trans. JIM, 40[9] (1999) pp.855-858
Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Qian Wang and Yoshiyuki Kawazoe

18. Stable Structures of Neutral and Charged Iron Clusters by
Self-Consistent Tight-Binding Molecular-Dynamics 228
Mater. Trans. JIM, 40[9] (1999) pp.859-862
Akito Taneda and Yoshiyuki Kawazoe

19. *Ab Initio* Molecular Dynamics in an All-Electron Mixed-Basis Approach:
Application to Atomic Insertions to C₆₀..... 232
Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 7 (1999) pp.621-630
Keiichiro Shiga, Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama, Yoshiyuki Kawazoe
and Tsutomu Ohtsuki

20. Cluster Growth in Cluster Beam Deposition Process by Direct Simulation
Monte Carlo..... 242
J. Magn. Soc. Jpn., 23[S1] (1999) pp.103-106
Hiroshi Mizuseki, Ying Jin, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe

21. Unified Spin-Wave Theory for Quantum Spin Systems with
Single-Ion Anisotropies..... 246
J. Phys. A, 32 (1999) pp.6687-6704
Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe

22. Jahn-Teller Distortion in Dangling-Bond Linear Chains Fabricated on a
Hydrogen-Terminated Si (100) -2×1 Surface..... 264
Phys. Rev. Lett., 82 (1999) pp.4034-4037
T. Hitosugi, S. Heike, T. Onogi, T. Hashizume, S. Watanabe, Z.-Q. Li,
K. Ohno, Y. Kawazoe, T. Hasegawa and K. Kitazawa

23. Size Effect on Quasibound States and Negative Differential Resistances
in Step-Barrier Structures..... 268
Phys. Lett. A, 261 (1999) pp.114-118
Yong Guo, Bing-Lin Gu, Zhong Zeng and Yoshiyuki Kawazoe

24. Orbital Correlation and Magnetocrystalline Anisotropy in One-Dimensional
Transition-Metal Systems..... 273
Phys. Rev. B, 60[13] (1999) pp.9545-9549
Lei Zhou, Ding Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe

25. The Mechanisms for Pressure-Induced Amorphization of Ice I_h 278
 Nature, 400 (1999) pp.647-649
 John S. Tse, Dennis Dwayne Klug, Chris A. Tulk, Ian Swainson,
 E C. Svensson, Chun-Keung Loong, Vladimir Petrovich Shpakov,
 Vladimir Romanovich Belosludov, Rodion Vladimirovich Belosludov
 and Yoshiyuki Kawazoe
26. Transmission through a Mesoscopic Ring with a Quantum Dot 281
 Phys. Lett. A, 262 (1999) pp.245-250
 Jian Wu, Bing-Lin Gu, Junjie Liu, Youjiang Guo, Jia-Lin Zhu,
 Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
27. Site-Percolation Models Including Heterogeneous Particles on a Square
 Lattice 287
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1314-1318
 Ryoji Sahara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
28. Effect of Hydrogen on the Magnetism and Its Solubility in
 Ferromagnetic Nickel 292
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1244-1248
 Jing-Zhi Yu, Qiang Sun, Qian Wang and Yoshiyuki Kawazoe
29. Capacitance of Microclusters 297
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1224-1227
 Qian Wang, Qiang Sun, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
30. Effect of Lattice Coherency on Solution Energies of Impurities:
 Stability of an Epitaxial InAs Monolayer Deposited on GaAs 301
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) 1295-1300
 Sornthep Vannarat, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
31. A Tight-Binding Molecular-Dynamics Study of Copper Clusters 307
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1255-1257
 Akito Taneda and Yoshiyuki Kawazoe

32. Prediction of Effect of Ti on the (111) and (100) Antiphase Boundary Energy in Ni₃Al..... 310
 Mater, Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1301-1305
 Hai-Ping Wang, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
33. All-Electron Mixed-Basis Calculation with Conjugated Gradient Method to Optimize Structure of Copper Clusters..... 315
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1205-1208
 Y. C. Bae, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
34. Marangoni Convection in Half-Zone Liquid Bridge..... 319
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1331-1336
 Zhong Zeng, Hiroshi Mizuseki, Kyoko Ichinoseki, Kazuyuki Higashino and Yoshiyuki Kawazoe
35. Dielectric Response Functions Studied by an All-Electron Mixed-Basis Approach..... 325
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1209-1212
 Soh Ishii, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
36. First-Principles Studies on the Structural and Magnetic Properties of 3d/(Cu, Ag, Au) Multilayers..... 329
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1228-1236
 Jian-Tao Wang, Lei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
37. Simulation of Crystal Growth in Solution by Hybrid Modeling..... 337
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1337-1341
 Hiroshi Mizuseki and Yoshiyuki Kawazoe
38. Orbital Correlation Effects in Transition Metal Microclusters..... 342
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1237-1243
 Lei Zhou, Jian-Tao Wang, Dingsheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
39. Multi-Valued Magnetic Recording Materials Predicted by Self-Organized Magnetization Dynamics..... 349
 Mater. Trans. JIM, 40[11] (1999) pp.1319-1322
 Masahito Ishihara, Hiroshi Mizuseki, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

40. In-Situ Infrared Spectroscopy of a Photoirradiated Potassium-Doped C₆₀ Film..... 353
Chem. Phys. Lett., 315 (1999) pp.19-24
Jun Onoe, Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Toshiki Hara, Yoshiyuki Kawazoe and Kazuo Takeuchi
41. *Ab Initio* Study of Phonons in Hexagonal GaN..... 359
Phys. Rev. B, 60[23] (1999) pp.511-514
Krzystof Parlinski and Yoshiyuki Kawazoe
42. *Ab Initio* and Lattice Dynamics Studies of the Vibrational and Geometrical Properties of the Molecular Complex of Hydroquinone and C₆₀..... 363
Chem. Phys. Lett., 312 (1999) pp.299-305
Rodion V. Belosludov, Marcel Sluiter, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
43. Interactions and Oscillations in Quantum Dots..... 370
J. Phys.: Condens. Matter, 11 (1999) pp.229-238
Jia-Lin Zhu, Ziqiang Zhu, Yoshiyuki Kawazoe and Takafumi Yao
44. Can *Ab Initio* Simulation Really Predict Properties of Materials Prior to Actually Carrying out the Experiments?..... 380
Bull. Mater. Sci., 22 [3] (1999) pp.735-739
Yoshiyuki Kawazoe
45. Molecular Dynamics Simulation on Deformation Dynamics of Ni and Ni₃Al Single Crystals and Ni/Ni₃Al Composite Crystal..... 385
Mater. Trans. JIM, 40 (1999) pp.1281-1287
Tomoyasu Aihara and Tomoyoshi Sho
46. *Ab Initio* Study of Metastability in Refractory Metal Based Systems..... 392
Phys. Rev. Lett., 83[8] (1999) pp.1621-1623
Cecil Berne, Alain Pasturel, Marcel Sluiter and Bernard Vinet
47. Molecular Dynamics Study of a V₂O₅ Crystal..... 395
Solid State Comm., 110[9] (1999) pp.497-502
H. Chiba, K. Nishidate, M. Baba, N. Kumagai, T. Sato and K. Nishikawa

48. Effect of Stripes on Electronic States in Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 401
 Phys. Rev. Lett.,82[24] (1999) pp.4910-4913
 T. Tohyama, S. Nagai, Y. Shibata and S. Maekawa
49. Quantum Theory for the Longitudinal Josephson Plasma in High- T_c
 Superconductors: QED in 1D Josephson Junction Array..... 405
 J. Phys. Soc. Jpn., 68[6] (1999) pp.2010-2018
 Tomio Koyama
50. Momentum Dependence of Resonant Inelastic X-ray Scattering Spectrum in
 Insulating Cuprates..... 414
 Phys. Rev. Lett.,83[18] (1999) pp.3705-3708
 K. Tsutsui, T. Tohyama and S. Maekawa
51. Magnetic Interaction in Insulating Cuprates..... 418
 J. Low Temp. Phys., 117 (1999) pp.389-393
 Yoshiaki Mizuno, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
52. Interchain Interactions and Magnetic Properties of Li_2CuO_2 423
 Phys. Rev. B,60[9] (1999) pp.6230-6233
 Y. Mizuno, T. Tohyama and S. Maekawa
53. Theory of Orbital Orderings and Excitations in Perovskite Manganites
 –Their Observation by Resonant X-ray Scattering—..... 427
 Jpn. J. Appl. Phys., 38 (1999) pp.400-403
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa
54. Two Ferromagnetic States in Magnetoresistive Manganites
 – First Order Transition Driven by Orbitals –..... 431
 Phys. Mang., (1999) pp.57-70
 S. Maekawa, S. Ishihara and S. Okamoto
55. Theory of Anomalous X-ray Scattering in a Variety of
 Orbital Ordered Manganites..... 445
 Solid-States Sci.,125 (1999) pp.84-94
 Sumio Ishihara and Sadamichi Maekawa

56. Transition between Two Ferromagnetic States Driven by Orbital Ordering
in $\text{La}_{0.88}\text{Sr}_{0.12}\text{MnO}_3$ 456
Phys. Rev. Lett., 82 (1999) pp.4328-4331
Y. Endoh, K. Hirota, S. Ishihara, S. Okamoto, Y. Murakami, A. Nishizawa,
T. Fukuda, H. Kimura, H. Nojiri, K. Kaneko and S. Maekawa
57. Motion of Holes in Two-Dimensional Ferromagnetic Manganites:
Comparison with High T_c Cuprates 460
Physica C, 317-318 (1999) pp.205-210
W. Koshibae and S. Maekawa
58. Monte Carlo Simulation Study of the High-temperature Phase Diagram
of Model C_{60} Molecules 466
Journal of Chemical Physics, 111[13] (1999) pp.5955-5963
M. Hasegawa and K. Ohno
59. *Ab Initio* Study of Dopant Insertion into Carbon Nanotubes 475
J. Chem. Phys., 111[5] (1999) p.2164-2168
A. A. Farajian, K. Ohno, K. Esfarjani, Y. Maruyama and Y. Kawazoe
60. Stripe Stability in the Extended t - J Model on Planes and
Four-Leg Ladders 480
Phy. Rev. B, 59[17] (1999) pp. R11649-R11652
T. Tohyama, C. Gazza, C. T. Shih, Y. C. Chen, T. K. Lee, S. Maekawa
and E. Dagotto
61. Effect of Magnetic Frustration on the Single-hole Spectral Function in the
 t - t' - t'' - J Model 484
Phys. Rev. B, 59 (1999) pp.1840-1844
Y. Shibata, T. Tohyama and S. Maekawa

<2000 年>

1. *Ab Initio* Studies of Phonons in MgO by the Direct Method Including
LO Mode 489
J. Phys. Chem. Solids, 61 (2000) pp.87-90
K. Parlinski, J. Lazewski and Y. Kawazoe

2. Ab Initio Calculations of Phonons in LiNbO_3 493
 Phys. Rev. B,61 (2000) pp.272-278
 K. Parlinski, Z. Q. Li and Y. Kawazoe

3. Systematic Study of Foreign-Atom-Doped Fullerenes by Using
 a Nuclear Recoil Method and Their MD Simulation..... 500
 J. Chem. Phys., 112 (2000) pp.2834-2842
 T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, Y. Maruyama and K. Masumoto

4. Spin Liquid State around a Doped Hole in Insulating Cuprates..... 509
 J. Phys. Soc. Jpn., 69 (2000) pp.9-12
 Takami Tohyama, Yasumasa Shibata, Sadamichi Maekawa, Z.-X. Shen,
 Naoto Nagaosa and Lance L. Miller

5. Orbital Degree of Freedom and Phase Separation in Ferromagnetic Manganites
 at Finite Temperatures..... 513
 Phys. Rev. B,61 (2000) pp.451-458
 S. Okamoto, S. Ishihara and S. Maekawa

6. Resonant Inelastic X-ray Scattering Spectrum in High- T_c Cuprates..... 521
 Physica B, 284-288 (2000) p.457-458
 Kenji Tsutsui, Hiroshi Kondo, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

7. Electronic Structure and Excitation Spectra in Doped Nickelates..... 523
 Physica B, 284-288 (2000) pp.1471-1472
 Kenji Tsutsui, Wataru Koshibae and Sadamichi Maekawa

8. Resonant Inelastic X-ray Scattering in One-dimensional Copper Oxides..... 525
 Phys. Rev. B,61 (2000) p.7180-7182
 K. Tsutsui, T. Tohyama and S. Maekawa

9. Phase Transition in Perovskite Manganites with Orbital Degree of
 Freedom..... 528
 Phys. Rev. B,61 (2000) pp.14647-14655
 S. Okamoto, S. Ishihara and S. Maekawa

[2]. 国際会議発表論文

<1999 年>

1. The Latest Development of KIND -- A Materials Database for Non-Equilibrium and Metastable Phases..... 538
IUMRS-ICAM'99 ABSTRACTS II, Beijing, China
(1999.6.15-18, Invited talk) pp.616-617
Jing-Zhi Yu
2. How Well Physical, Chemical, and Mechanical Properties Can be Predicted by Ab Initio Techniques?..... 539
International Conference on Physics of Atomic Collisions, Sendai, Japan
(1999.7.24-27, Keynote talk)
Yoshiyuki Kawazoe
3. Growth Processes of Magnetic Clusters Studied by Direct Simulation Monte Carlo Method..... 541
44th MMM (Magnetism & Magnetic Materials), San Jose, CA, U.S.A
(1999.11.15-18) pp.6561-6563
H. Mizuseki, Y. Jin, Y. Kawazoe and Luc T. Wille
4. Dynamics of Magnetic Domain Walls in an Oscillating Field..... 544
44th MMM (Magnetism & Magnetic Materials), San Jose, CA, U.S.A
(1999.11.15-18) pp.6499-6501
Han-Ting Wang and S. T. Chui
5. Spin Injection and Magnetoresistance in Ferromagnet – Superconductor – Ferromagnet Tunnel Junctions..... 547
44th MMM (Magnetism & Magnetic Materials), San Jose, CA, U.S.A
(1999.11.15-18) pp.5227-5229
S. Takahashi, H. Imamura and S. Maekawa
6. Numerical Simulation of Oscillatory Thermocapillary Convection in Liquid Bridge..... 550
SPIE's 44th Annual Meeting Materials Research in Low Gravity II,
Denver, Colorado, U.S.A (1999.7.19-21) pp.353-362
Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Higashino and Y. Kawazoe

13. Ab Initio Study of Transitory Metastable Phases Solidified by Drop-tube Processing..... 581
 Thermodynamic and Structural Properties of Alloy Materials, Oranjestad, Aruba (1999.6.20-24) pp.233-237
 C. Berne, A. Pasturel, M. Sluiter and B. Vinet
14. Magnetic Interaction in Insulating Cuprates..... 586
 MOS'99 (International Conference on Physics and Chemistry of Molecular and Oxide Superconductors), Stockholm, Sweden (1999.7.28-8.2) p.46
 Y. Mizuno, T. Tohyama and S. Maekawa
15. Role of Stripes in Spin and Charge Dynamics of Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 587
 MOS'99 (International Conference on Physics and Chemistry of Molecular and Oxide Superconductors), Stockholm, Sweden (1999.7.28-8.2) p.159
 T. Tohyama, S. Nagai, Y. Shibata and S. Maekawa
16. Photoexcited State and Nonlinear Optical Response in Mott Insulators..... 588
 The Fourth BUTSUKO Symposium on Phase Control in Spin-Charge-Photon Coupled Systems, Tokyo, Japan (1999.11.24-26, Invited talk)
 Takami Tohyama, Yoshiaki Mizuno, Kenji Tsutsui and Sadamichi Maekawa
17. Differences in Optical Conductivity between One- and Two-dimensional Doped Nickelates..... 589
 JRCAT Workshop Complex Phenomena of Correlated Electrons in Oxides Hawaii, U.S.A (1999.5.26-29) p.29C
 W. Koshibae, K. Tsutsui and S. Maekawa
18. Spin-Induced Peierls Instability in Doped Haldane System..... 590
 JRCAT Workshop Complex Phenomena of Correlated Electrons in Oxides Hawaii, U.S.A (1999.5.26-29) p.7
 Masanori Yamanaka, Masaki Oshikawa, Wataru Koshibae and Sadamichi Maekawa

19. Orbital Degree of Freedom and Phase Separation in Perovskite
Manganites..... 591
JRCAT Workshop Complex Phenomena of Correlated Electrons in Oxides
Hawaii, U.S.A (1999.5.26-29) p.13
S. Okamoto, S. Ishihara and S. Maekawa
20. Orbital Ordering / Fluctuation in Manganites and Resonant X-ray
Scattering..... 592
JRCAT Workshop Complex Phenomena of Correlated Electrons in Oxides
Hawaii, U.S.A (1999.5.26-29, Invited talk) p.28D
S. Ishihara, S. Okamoto and S. Maekawa
21. The Magnetic Interaction in 1D, 2D, and Ladder Cuprates..... 593
12th International Symposium on Superconductivity, Morioka, Japan
(1999.10.17-19) p.76
Y. Mizuno, T. Tohyama and S. Maekawa
22. Resonant Inelastic X-ray Scattering in Insulating Cuprates: A Numerical
Study of the Hubbard Model..... 593
12th International Symposium on Superconductivity, Morioka, Japan
(1999.10.17-19) p.76
K. Tsutsui, H. Kondo, T. Tohyama and S. Maekawa
23. Charge Stripes and Electroic States in Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 594
12th International Symposium on Superconductivity, Morioka, Japan
(1999.10.17-19) p.18
Y. Shibata, T. Tohyama, S. Nagai and S. Maekawa
24. The Evolution of Spectral Function from Insulator to Superconductor
What Do We Learn from Angle-Resolved Photoemission?..... 594
12th International Symposium on Superconductivity, Morioka, Japan
(1999.10.17-19) p.19
T. Tohyama and S. Maekawa

<2000 年>

1. Elastic Interaction Between Heteroepitaxial Coherent Islands..... 595
The Third SANKEN International Symposium, Osaka, Japan
(2000.3.14-15) pp.138-139
S. Vannarat, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
2. AC Response of Doped Nanotube Junctions..... 597
The Third SANKEN International Symposium, Osaka, Japan
(2000.3.14-15) p.164
Keivan Esfarjani, Amir. A. Farajian, Siu Tat Chui and Yoshiyuki Kawazoe
3. Ab Initio Calculations of Phase Stability in Alloys..... 598
Proceedings for International Symposium on Advanced Materials 2000,
Sendai, Japan (2000.5.12) p.163
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
4. Spin Injection, Accumulation, and Transport in Ferromagnet/
Superconductor/ Ferromagnet Tunnel Junctions..... 599
International Symposium on Nanoscale Magnetism and Transport, Sendai,
Japan (2000.3.8-10) pp.78-79
S. Takahashi, H. Imamura and S. Maekawa
5. Charge Stripes and Electronic States in Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 601
US-Japan Neutron Scattering Workshop—Stripe in Transition Metal Oxides—,
Hawaii, U.S.A (2000.1.26-29) p.20
Takami Tohyama, Yasumasa Shibata, Makoto Takahashi
and Sadamichi Maekawa
6. Thermopower in Cobalt Oxides..... 602
US-Japan Neutron Scattering Workshop—Stripe in Transition Metal Oxides—,
Hawaii, U.S.A (2000.1.26-29) p.24
W. Koshibae, K. Tsutsui and S. Maekawa

7. Magnetic Ordering, Orbital Structure and Resonant X-ray Scattering in CMR
Manganites..... 603
US-Japan Neutron Scattering Workshop— Stripe in Transition Metal Oxides—,
Hawaii, U.S.A (2000.1.26-29) p.25
S. Ishihara, S. Okamoto and S. Maekawa

8. Resonant Inelastic X-ray Scattering in Copper Oxides..... 604
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.13
Kenji Tsutsui, Hiroshi Kondo, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

9. Quantum Theory for the Josephson Plasma in High- T_c Superconductors•• 605
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25, Invited talk) p.51
Tomio Koyama

10. Systematic Study of Magnetic Interactions in Insulating Cuprates..... 606
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.107
Yoshiaki Mizuno, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

11. Are Spin and Charge Really Separated in HTS?
-Comparison between Theory and Experiment-..... 607
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.156
Sadamichi Maekawa and Takami Tohyama

12. Microscopic Theory for the Josephson Plasma in High- T_c Superconductors:
Interplay Between the Josephson Current and the c-axis Optical Phonons•• 608
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.202
Tomio Koyama

13. Collective Josephson Vortex Dynamics and Josephson Plasma Excitations
in Layered Cuprate Superconductors..... 609
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.203
M. Machida, T. Koyama and M. Tachiki
14. Charge Stripes in Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 610
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25, Invited talk) p.275
Takami Tohyama, Yasumasa Shibata and Sadamichi Maekawa
15. Temperature Dependence of Spin and Charge Correlations in
Stripe Phase..... 611
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25) p.277
Yasumasa Shibata, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa
16. Spin Injection in Ferromagnet/Superconductor/Ferromagnet Tunnel
Junctions..... 612
6th International Conference on Materials and Mechanisms of
Superconductivity and High Temperature Superconductor, Houston, U.S.A
(2000.2.20-25, Invited talk) p.502
Saburo Takahashi, Hiroshi Imamura and Sadamichi Maekawa

[3]. 紀要等

1. 合金クラスター集合体の創製・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 613
新素材設計開発施設共同利用研究報告書平成9年度 (1998.6) pp.193-198
隅山兼次、鈴木謙爾、前田弘、川添良幸、粕谷厚生、神山智明、
小野寺秀也、今野豊彦、櫻井雅樹、胡長武、水関博志、若生公郎、
日原岳彦、Rajaratnum Sivamohan、Lei Zhou、Donliang Peng、山室佐益
菅野松佐登
2. スーパーコンピューティングシステムの2000年対応・・・・・・・・・・・・ 619
平成11年度機器・分析技術研究会 (1999) pp.159-162
一関京子、秋山庸子、伊藤敏行、和田繁男、三浦重幸、佐藤和弘、
川添良幸、豊岡雅人、松本秀一、佐藤俊哉、鬼頭宣行、橋川光一
3. 技術部実績入出力システムの構築・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 623
平成11年度機器・分析技術研究会 (1999) pp.163-166
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
4. 金属マイクロクラスターの持つ特異な磁性とそれを活用した3次元
構造超高密度磁気記録媒体の可能性・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 627
先導的科学技术共同研究報告書「ナノクラスター構造の創製とその応用」
(1999.3) pp.75-84
川添良幸、水関博志、太田憲雄
5. アントラセン結晶中の光塑性効果の機構の研究・・・・・・・・・・・・ 637
平成11年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.162
川添良幸、大野かおる、岡田 勇、小林幸次郎
6. サブナノスケール・クラスター及び擬似孤立単一分子状態・・・・・・・・・・・・ 638
平成11年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.200-201
川添良幸、吉成武久、大西彰正

7. 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..... 640
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.116
近藤 保、寺寄 亨、真船文隆、安松久登、市橋正彦、川添良幸、
大野かおる
8. フラーレン光重合ポリマーの構造に関する研究..... 641
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.121-122
尾上順、橋祐一、Keivan Esfarjani、大野かおる、川添良幸
9. クラスタ内包フラーレンの構造と物性..... 643
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.178
奥健夫、川添良幸、大野かおる、Qiang Sun、志賀圭一郎
10. 第一原理計算によるリラクサー強誘電体の低温構造決定..... 644
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.179
武末尚久、Marcel Sluiter、川添良幸
11. 超臨界状態の第一原理分子動力学計算..... 645
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.293-294
池庄司民夫、劉子敬、川添良幸
12. NaBr 結晶中の Cu^+ イオンの安定位置..... 647
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.295
長坂慎一郎、高橋良雄、新井一博、大野かおる、川添良幸
13. 相転移の理論的およびシミュレーションによる研究..... 648
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.132
長谷川正之、大野かおる
14. 準結晶における低エネルギー励起に関する研究..... 649
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6) p.111
石井 靖

15. 担持遷移金属マイクロクラスターの反応性に関する研究…………… 650
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.123-124
村上純一、吉村和記、多井豊、丸山豊、五十嵐一男
16. 分子動力学法の格子欠陥への応用…………… 652
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.165-166
進藤浩一、西館数芽
17. 平成11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…………… 654
平成 11 年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (2000.6)
pp.347-354
川添良幸、大野かおる

IV. 予稿集

<1997年> (追加分)

1. コンピューターの中でどこまで材料を設計できるか? 663
第 68 回 金属材料研究所 夏期講習会 (1997.7) pp.2(1-23)
川添良幸

<1999年>

1. Transmission Properties in Magnetic-barrier Structures 685
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.212 No.336
Bing-Lin Gu, Yong Guo, Jian Wu, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
2. Transmission Through a Mesoscopic Ring with a Quantum Dot 685
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.212 No.337
Bing-Lin Gu, Jian Wu, Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
3. モンテカルロ直接法によるクラスター成長のシミュレーション研究 686
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.252 No.458
水関博志、Ying Jin、余京智、川添良幸
4. 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
帯電した遷移金属クラスターの構造安定性 686
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.253 No.461
種田晃人、川添良幸
5. 繰り込みポテンシャルを用いた格子モデルによる相変態の研究 686
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.262 No.489
佐原亮二、市川浩、水関博志、M. Sluiter、大野かおる、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第一原理研究..... 687
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.265 No.497
余京智、孫強、周磊、王鼎盛、川添良幸
7. Applicability of LSDA to the Magnetocrystalline Anisotropy Problems
in One-dimensional Transition Metal Systems..... 687
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.265 No.498
周磊、王鼎盛、川添良幸
8. Exchange Interaction and Neel Temperature of Antiferromagnets fcc Fe and
Mn Calculated from First Principles..... 687
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.265 No.499
Ding-Sheng Wang, Yu-Mei Zhou and Yoshiyuki Kawazoe
9. 全電子第一原理計算の重要性とその材料設計への適用..... 688
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.269 No.509
川添良幸
10. 全電子混合基底法によるGW近似のクラスターへの適用..... 688
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.269 No.510
石井聡、大野かおる、川添良幸
11. 共役勾配法を用いた全電子混合基底法による銅クラスターの構造
最適化計算..... 688
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.269 No.511
Eizo Bei, Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
12. 第一原理による純 Ca の fcc-bcc 相平衡..... 689
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.326 No.682
川合史章、M. Sluiter、川添良幸

13. Prediction of Ti Segregation at (100) and (111) APBs in Ni₃Al..... 689
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.327 No.683
H. P. Wang, M. Sluiter and Y. Kawazoe
14. Explanation for the Heat Capacity Anomaly in Ordered Alloys..... 689
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.327 No.684
M. Sluiter and Y. Kawazoe
15. ナノサイズ界面のすべり摩擦..... 690
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.47 No.S1-9
丸山豊、村上純一、五十嵐一男、種村栄
16. 陽電子消滅同時計数ドップラー広がり法による改良 9Cr1Mo 鋼の
クリープ変形と時効の研究..... 690
日本金属学会春期大会講演概要 第 124 回 東京 (1999.3.29-31)
p.418 No.962
永井康介、長谷川雅幸、唐政、島村健男、中村規子
17. Nonlinear Coherent Transport in Doped Nanotube Junctions..... 691
第 17 回 フラーレン総合シンポジウム, 岐阜 (1999.8) p.172
Amir A. Farajian, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
18. Effect of Electron Interactions on the Electronic Structure of Carbon
Nanotubes..... 692
第 17 回 フラーレン総合シンポジウム, 岐阜 (1999.8) p.179
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
19. コンピュータシミュレーションによる結晶成長の研究..... 693
第 69 回 金属材料研究所 夏期講習会 (1999.8) pp.1B1-1B30
川添良幸

20. Orbital Correlation Effect in Very Small Fe, Co, and Ni Microclusters····· 722
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・
磁性制御」第5回研究会 仙台 (1999.8.19-20)
Lei Zhou, Yoshiyuki Kawazoe and Ding-Sheng Wang
21. Structure and Properties of Magic Iron Oxide Cluster····· 723
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・
磁性制御」第5回研究会 仙台 (1999.8.19-20)
Q. Sun, Q. Wang, M. Sakurai, K. Sumiyama and Y. Kawazoe
22. 中性および帯電した鉄クラスターの構造安定性····· 724
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・
磁性制御」第5回研究会 仙台 (1999.8.19-20)
種田晃人、川添良幸
23. *GW*近似によるクラスターの電子状態····· 726
戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・
磁性制御」第5回研究会 仙台 (1999.8.19-20)
石井聡、大野かおる、川添良幸
24. HfV_2H_x 合金のプロチウム吸蔵量にともなう特性変化に関する第一
原理計算····· 728
日本金属学会秋期大会講演概要 第125回 金沢 (1999.11.20-22)
p.124 No.S6-8
相原智康、川添良幸、P. Blaha、K. Schwarz
25. Orbital Correlation Effect to Very Small Transition Metal Microclusters·· 728
日本金属学会秋期大会講演概要 第125回 金沢 (1999.11.20-22)
p.219 No.221
Lei Zhou, Jian-Tao Wang, Dingsheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
26. 前処理付き共役勾配法を用いた全電子混合基底法による遷移金属
クラスターの構造最適化計算····· 729
日本金属学会秋期大会講演概要 第125回 金沢 (1999.11.20-22)
p.220 No.223
Eizo Bei, Keivan Esfarjani, Marcel Sluiter, Kaoru Ohno
and Yoshiyuki Kawazoe

27. 第一原理GW近似による原子クラスターのイオン化ポテンシャル
の計算..... 729
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.-20-22)
p.220 No.224
石井聡、大野かおる、川添良幸
28. 2種類の粒子サイズを含む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..... 730
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.221 No.227
佐原亮二、水関博志、大野かおる、川添良幸
29. 中性および帯電したチタンクラスターの構造安定性..... 730
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.224 No.235
種田晃人、川添良幸
30. モンテカルロ法による Fe/Au 多層膜のキュリー温度の研究..... 731
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.250 No.313
王建涛、周磊、王鼎盛、川添良幸
31. 第一原理による純 Ca の fcc-bcc 相平衡及び弾性率の計算..... 731
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.362 No.656
川合史章、Marcel Sluiter、川添良幸
32. ポテンシャル繰り込み理論の開発及びそれを用いた格子モデル
による CuAu、C₆₀ 系に対する相転移の研究..... 732
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.363 No.657
佐原亮二、市川浩、水関博志、Marcel Sluiter、大野かおる、
川添良幸

33. Prediction of the Enthalpy of Mixing of Alloys..... 732
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.363 No.658
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
34. 第一原理による C_xN_{1-x} 結晶の 1s 軌道エネルギーの研究..... 732
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.371 No.683
森里嗣生、大野かおる、川添良幸
35. カーボンナノチューブにおけるコヒーレントな電子輸送..... 733
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.372 No.685
呉健、顧秉林、余京智、川添良幸
36. 強磁性金属 Fe, Ni および Co における水素溶解度に関する熱力学
モデリング..... 733
日本金属学会秋期大会講演概要 第 125 回 金沢 (1999.11.20-22)
p.527 No.1157
余京智、孫強、王前、川添良幸
37. 第一原理計算に基づくナノスケールデバイス設計..... 734
第 4 回 物質・材料設計のための仮想実験技術シンポジウム
(1999.10) pp.12-13
川添良幸
38. 第一原理計算による原子レベルデバイス設計の現状と将来展望..... 736
第 22 回 情報化学討論会 米沢 (1999.11.10-12) pp.8-9
川添良幸
39. 第一原理による超硬質材料 C_xN_{1-x} 結晶の 1s 軌道エネルギーの研究..... 738
東北大学金属材料研究所第 98 回秋季講演会 (1999.12) p.24
森里嗣生、大野かおる、川添良幸
40. 第一原理による純 Ca の fcc-bcc 相平衡に関する研究..... 739
東北大学金属材料研究所第 98 回秋季講演会 (1999.12) p.25
川合史章、川添良幸、Marcel Sluiter

41. *Ab initio* studies on the exchange interactions and magnetic phase transition in layered FeAu superlattices..... 740
 東北大学金属材料研究所第 98 回秋季講演会 (1999.12) p.26
 Jian-Tao Wang, Lei Zhou, Ding Sheng Wang and Yoshiyuki Kawazoe
42. 厳密な定式化による磁区構造の時間発展経過のシミュレーション..... 741
 東北大学金属材料研究所第 98 回秋季講演会 (1999.12) p.27
 石原正仁、大野かおる、川添良幸
43. Elastic Model of Self-assembled Quantum Dot..... 742
 東北大学金属材料研究所第 98 回秋季講演会 (1999.12) p.28
 Sornthep Vannarat, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
44. XPS Study of Air-exposed C₆₀ Films: Origin of the O 1s Core Peak..... 743
 第 11 回日本 MRS 学術シンポジウム 神奈川 (1999.12.16-17) p.234
 J. Onoe, K. Takeuchi, K. Ohno and Y. Kawazoe
45. Hubbard 模型に対する X 線ラマンスペクトル..... 744
 日本物理学会講演概要集 第 54 回年会 東広島 (1999.3.28-31) p.530
 筒井健二、遠山貴己、前川禎通
46. 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の効果..... 745
 日本物理学会講演概要集 第 54 回年会 東広島 (1999.3.28-31) p.530
 柴田康雅、遠山貴己、前川禎通
47. エッジ共有型一次元鎖 Li₂CuO₂ の磁気励起..... 746
 日本物理学会講演概要集 第 54 回年会 東広島 (1999.3.28-31) p.492
 水野義明、遠山貴己、前川禎通
48. (La, Sr)₂CuO₄ の電子状態と励起スペクトル..... 747
 日本物理学会講演概要集 第 54 回年会 東広島 (1999.3.28-31) p.551
 遠山貴己、永井進、柴田康雅、前川禎通

49. さまざまな結合トポロジを持つポリマーの臨界係数(2) 748
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 第 2 号,岩手
(1999.9.24-27) p.305
志田和人、大野かおる、川添良幸
50. 3次元系における多粒子系ランダムウォークセルオートマトン
モデル..... 749
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
(1999.9.24-27) 26pV-5
西館数芽、馬場守、千葉秀幸、伊藤孝徳、児玉浩一、西川清
51. 酸化バナジウムの分子動力学計算機実験..... 750
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
(1999.9.24-27) p.883
千葉秀幸、西館数芽、馬場守、進藤浩一、熊谷直昭、佐藤孜、
西川清
52. カーボンナノチューブのフォノンスペクトルの強束縛近似分子
動力学計算..... 751
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
(1999.9.24-27) p.894
伊藤孝徳、西館数芽、馬場守、進藤浩一、長谷川正之、佐藤孜、
西川清
53. 電子励起から見た反強磁性と高温超伝導..... 752
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
(1999.9.24-27) p.546-547
遠山貴己
54. $(\text{La, Sr})_2\text{CuO}_4$ の電子状態と励起スペクトル II 754
日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
(1999.9.24-27) p.575
柴田康雅、遠山貴己、前川禎通

55. ハバード模型に対する X 線ラマンスペクトル II 755
 日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
 (1999.9.24-27) p.550
 筒井健二、遠山貴己、前川禎通
56. 二次元及び梯子型銅酸化物絶縁体の磁気相互作用
 -4 体相互作用の効果- 756
 日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
 (1999.9.24-27) p.550
 水野義明、遠山貴己、前川禎通
57. ドープしたニッケル酸化物の電子状態 757
 日本物理学会秋の分科会講演概要集 第 54 巻 岩手
 (1999.9.24-27) p.452
 小椎八重航、筒井健二、前川禎通
58. Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Insulating Cuprates:
 A Numerical Study of the Hubbard Model 758
 Proceedings for ISS'99 盛岡 (1999.10.17-19) pp.197-199
 Kenji Tsutsui, Hiroshi Kondo, Takami Tohyama and Sadamichi Maekawa

<2000 年>

1. Finite Size Effects on Transmission Properties through Carbon Nanotubes • 761
 第 18 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 岡崎
 (2000.1.13-14) p.81
 呉健、余京智、川添良幸
2. Structure and Electronic Properties of Carbon Onions 762
 第 18 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 岡崎
 (2000.1.13-14) p.107
 橋祐一、K. Esfarjani、川添良幸、大澤映二

3. Ab-initio Molecular Dynamics Simulation for the Insertion Process of Si and Ca atoms into C_{74} 763
 第 18 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 岡崎
 (2000.1.13-14) p.143
 志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸、平田孝道、畠山力蔵

4. Geometry and Electronic Structures of Magic Transition Metal Oxide Clusters M_9O_6 (M: Fe, Co and Ni) 764
 戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・磁性制御」第 6 回研究会 仙台 (2000.3.6-7)
 Q. Sun, M. Sakurai, Q. Wang, K. Sumiyama and Y. Kawazoe

5. 遷移金属クラスターの構造におけるクラスター — 結晶遷移 765
 戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・磁性制御」第 6 回研究会 仙台 (2000.3.6-7)
 種田晃人、川添良幸

6. *Ab Initio* Molecular Dynamics Studies on Clusters 766
 戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・磁性制御」第 6 回研究会 仙台 (2000.3.6-7)
 V. Kumar and Y. Kawazoe

7. Role of Orbital Correlation in Magnetocrystalline Anisotropy and Orbital Polarization in Transition Metal Thin Films 768
 戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・磁性制御」第 6 回研究会 仙台 (2000.3.6-7)
 L. Zhou, D. Wang and Y. Kawazoe

8. Structure of Magic Ba Clusters and Magic Ba Suboxide Clusters 769
 戦略的基礎研究推進事業「合金クラスター集合体の極限構造・磁性制御」第 6 回研究会 仙台 (2000.3.6-7)
 Q. Wang, Q. Sun, J. Z. Yu, Y. Kawazoe and Y. Hashi

9. Magic Behavior and Possibilities of Wide Band Gap in Binary Cluster 771
 日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
 p.136 No.24 (特別講演)
 Vijay Kumar

10. チタンクラスターにおけるクラスター — 結晶遷移..... 771
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.139 No.33
種田晃人、川添良幸
11. 遷移金属(Fe, Ni, Co)酸化物ナノクラスターのマジック・ナンバー
・クラスターとその構造..... 772
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.142 No.41
櫻井雅樹、孫強、隅山兼治、川添良幸
12. フラーレンへの異種原子挿入過程の第一原理分子動力学シミュレーション..... 772
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.167 No.118
志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸
13. 第一原理計算による 3d-Au 人工格子の磁性に関する研究..... 772
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.206 No.234
王建涛、周磊、川添良幸
14. ニッケルにおける水素分子の分解に関する第一原理計算..... 773
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.399 No.819
余京智、孫強、王前、小野瀬うた子、秋山庸子、川添良幸
15. HfV₂H_x 合金中のプロチウムの占有状態に関する第一原理計算..... 773
日本金属学会春期大会講演概要 第 126 回 横浜 (2000.3.29-31)
p.406 No.841
相原智康、川添良幸、P. Blaha、K. Schwarz
16. モンテカルロ直接法によるクラスター成長のシミュレーション研究..... 774
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.75-78
水関博志、川添良幸、Luc T. Wille

17. 第一原理 *GW* 近似による Na クラスターの電子状態計算..... 778
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.83-85
石井聡、大野かおる、川添良幸
18. タイトバインディング分子動力学法による 3d 遷移金属クラスターの構造と磁性..... 781
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.87-90
種田晃人、川添良幸
19. 遷移金属(Fe, Co, Ni)酸化物自由クラスターのマジックナンバーと電子状態..... 785
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.91-93
櫻井雅樹、孫強、隅山兼治、川添良幸
20. First-Principles Studies on Magnetism of Ni Clusters Coated and Alloyed with Pd..... 788
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.99-101
Q. Wang, Q. Sun, J.-Z. Yu, Y. Hashi and Y. Kawazoe
21. C_{60} への N 原子内包過程の第一原理分子動力学シミュレーション..... 791
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.143-145
志賀圭一郎、大野かおる、川添良幸
22. 単成分および二成分系の正 20 面体と fcc クラスターのサイズ依存性の予測 -分子動力学計算-..... 794
超微粒子とクラスター懇談会第 4 回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.95-96
池庄司民夫

23. ナノクラスターのレビーウオーク拡散とカオス..... 796
超微粒子とクラスター懇談会第4回研究会講演論文集仙台
(2000.5.11-12) pp.103-105
丸山豊、村上純一、五十嵐一男、種村栄
24. Sn クラスターイオンの固体表面での散乱過程..... 799
超微粒子とクラスター懇談会第4回研究会講演論文集 仙台
(2000.5.11-12) pp.107-108
多井豊、山口渡、丸山豊、吉村和記、村上純一
25. タイトバインディング分子動力学法によるバナジウムクラスター
の安定構造..... 801
東北大学金属材料研究所第99回春季講演会 (2000.5.25-26) p.19
種田晃人、川添良幸
26. Usefulness of Materials with High Prandtl Number in Model Experiment
--Effect of Prandtl Number on Two-dimensional Thermocapillary Flow
in Half Zone..... 802
東北大学金属材料研究所第99回春季講演会 (2000.5.25-26) p.20
Z. Zeng, H. Mizuseki, K. Ichinoseki, K. Higashino and Y. Kawazoe
27. Geometry and Electronic Structures of Magic Transition Metal Oxide Clusters
 M_9O_6 (M : Fe, Co and Ni) 803
東北大学金属材料研究所第99回春季講演会 (2000.5.25-26) p.21
Q. Sun, M. Sakurai, Q. Wang, J.-Z. Yu, K. Sumiyama and Y. Kawazoe
28. *Ab Initio* Study on Ba Cluster..... 804
東北大学金属材料研究所第99回春季講演会 (2000.5.25-26) p.22
Q. Wang, Q. Sun, J.-Z. Yu, Y. Kawazoe and Y. Hashi
29. 金属材料研究所文献 Web データベースの公開..... 805
東北大学金属材料研究所第99回春季講演会 (2000.5.25-26) p.23
伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、一関京子、三浦重幸、佐藤和弘、
余京智、川添良幸

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 (1999.11.29-30)
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 (1999.4,10)
世話人 川添良幸
3. 『Indo-Japan Workshop on Materials Design by Computer Simulation』
Sendai (1999.8.24)
Organized by Yoshiyuki Kawazoe

VI. 新聞記事

1. 『日本人の標準脳モデル作成が佳境に』..... 807
日刊工業新聞 (1999.7.15)
2. 『氷の非結晶化機構を確認』..... 808
日刊工業新聞 (1999.8.19)
3. 『今井経団連会長ら首脳9人 東北大学金属材料研究所を視察』..... 809
日刊工業新聞 (1999.10.1)
4. 『ホヤゲノム計画拠点をわが国へ』..... 810
日刊工業新聞 (1999.10.19)

VII. 書籍(出版)

1. 『Advances in Scanning Probe Microscopy』
Edited by T. Sakurai and Y. Watanabe
Series Editor-in-Chief Y. Kawazoe
Springer (1999.11)

VIII. 雑誌等掲載解説記事

1. 『海のパインを遺伝子解析』…………… 811
川添良幸
東北大学新聞 第 292 号 (1999.7.12) p.2
2. 『金属学会会報データベースの公開』…………… 812
川添良幸、余京智、秋山庸子、伊藤敏行、谷口至良、山村力
まてりあ 38[4] (1999) pp.349-352
3. 『一万倍高速のコンピュータは作れるか?』…………… 816
川添研究室
金属材料研究所一般公開パンフレット (1999.11) p.23
4. 『チャレンジ! コンピュータワールド』…………… 817
情報・広報室
金属材料研究所一般公開パンフレット (1999.11) p.24
5. 『超伝導のヒ・ミ・ツ』…………… 818
前川研究室
金属材料研究所一般公開パンフレット (1999.11) p.31
6. 『アメリカ留学記』…………… 819
水関博志
第8回新素材設計開発施設ニュース (2000.1) p.8
7. 『20 世紀に輝いた東北の人 本多光太郎』…………… 820
川添良幸
東経連 5月号 (2000.5) pp.24-25

IX. TV 放映

1. 『ホヤが世界を変える!?
- ホヤから最先端科学技術への発信 -』…………… 822
川添良幸、佐竹正延
ミヤギテレビ特別番組 (2000.7.8 30 分)

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・・・・・・・・ 831
2. 情報・広報室長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員等一覧・・・・・・・・ 832
3. 東北大学金属材料研究所構内図・・・・・・・・・・・・・・・・ 833
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図・・・・・・・・・・・・・・・・ 834