

1995 年度スーパーコンピューティングシステム研究成果報告書

(1994 年 4 月～1996 年 3 月)

目次

- I. はじめに
- II. 研究内容概要
 1. DLA成長における外乱の効果……………1
東北大学金属材料研究所 水関博志、田中一美、胡暁、大野かおる、
川添良幸
 2. 3次元磁性人工格子による新しい超高密度磁気記録媒体の可能性……………7
東北大学金属材料研究所 水関博志、石原正仁、胡暁、川添良幸
 3. 良溶媒中の高分子の統計力学的性質のための大規模モンテカルロ……………11
シミュレーション
北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究所 志田和人
東北大学金属材料研究所 大野かおる、木村正行、川添良幸
 4. GGAを取り入れたクラスターの電子状態の研究……………13
東北大学金属材料研究所 志賀圭一郎、付栄堂、川添良幸
 5. 超高压下での半導体構造……………15
岩手大学人文社会科学部 進藤浩一、五味壮平
東北大学金属材料研究所 大野かおる
 6. 体心立方金属・合金におけるバイアス発生の機構……………16
東北大学金属材料研究所 松井秀樹、川添良幸
青森公立大 神山博
グリニッジ大 H. Rafii-Tabar
 7. チョクラルスキー法によるニオブ酸リチウム単結晶育成の…………… 17
最適条件の算出
三菱マテリアル・サイバースペース研究所 宇田聡
東北大学金属材料研究所 島村清史、福田承生

8. Fe/Co Fe/Ni 多層膜の電子状態と超微細磁場	19
東北大学金属材料研究所 高橋 学、胡曉、川添良幸	
9. 酸化物単結晶育成時の融液対流3次元解析	20
日本電気基礎研究所 柿本浩一	
日立東北ソフトウェア株式会社 八重樫育生	
東北大学金属材料研究所 水関博志、川添良幸	
10. 不均一液体の構造と相転移	22
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	
11. アモルファス、液体、ならびに結晶物質の分子動力学法による研究	24
東北大学金属材料研究所 相原智康、川添良幸、増本健	
12. 1次元ジョセフソン接合鎖の I-V 特性	26
東北大学金属材料研究所 小山富男	
13. XPS と DV-X _α 分子軌道法による M(CN) ₆ および M(CN) ₅ NO イオン (M=Fe, Mn, Cr) の電子状態の研究	27
東北大学金属材料研究所 松田秀幸、広川吉之助、奥正興	
14. 遷移金属酸化物の電子状態における不純物効果	29
東北大学金属材料研究所 小田島聡、松本秀樹	
15. 重い電子系や混合原子価系における異常な混合状態	31
東北大学金属材料研究所 高橋三郎、立木昌	
16. 電子ビーム励起による半導体の機能評価-CL/EBIC 像の解析	33
東北大学金属材料研究所 関口隆史、渡辺貴郎	
日立東北ソフトウェア株式会社 橋祐一	
17. 振動自然対流におよぼす慣性項の差分スキームによる影響	34
九州大学機能物質科学研究所 田川俊夫、尾添紘之	
東北大学金属材料研究所 福田承生	

18. 不規則構造系のスローダイナミクスの研究..... 36
金沢大学理学部物理学科 上原健太郎、小田竜樹、樋渡保秋
東北大学金属材料研究所 鈴木謙爾
19. 異方性結晶ならびに非晶質の構造に関する分子動力的研究..... 38
工業技術院 名古屋工業技術研究所 小川浩
東北大学金属材料研究所 相原智康
20. Si 結晶成長を再現する多体力を考慮したモンテカルロ..... 39
シミュレーション
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
三菱マテリアルサイバースペース研究所 宇田聡
21. 第一原理分子動力学法による C_{60} の安定性・反応性の研究..... 47
東北大学金属材料研究所 大野かおる、丸山豊、川添良幸
22. C_{60} アルカリ金属内包過程の第一原理シミュレーション..... 49
東北大学金属材料研究所 大野かおる、丸山豊、Keivan Esfarjani、
川添良幸
東北大学工学部電子工学科 佐藤徳芳、畠山力三、平田孝道
東北大学電気通信研究所 庭野道夫
23. 星型高分子の第2ビリアル係数のモンテカルロシミュレーション..... 51
東北大学金属材料研究所 大野かおる、川添良幸
北陸先端技術大学院大学情報科学研究所 志田和人、木村正行
24. ダイヤモンド薄膜成長のバリスティックモデル..... 53
東北大学金属材料研究所 大野かおる、胡曉、高橋学、伊藤未丈、
佐原亮二、川添良幸
25. 透明導電膜における点欠陥の電子構造解析..... 55
東京大学人工物研究センター 小高秀文、岩田修一、大西檜平
東北大学金属材料研究所 川添良幸
日立東北ソフトウェア株式会社 橋祐一

26. Co/Pt/Gd/Pt 人工格子の磁化過程の計算機シミュレーション..... 56
東北大学金属材料研究所 大場正志、高梨弘毅、三谷誠司、藤森啓安
27. 半導体中の欠陥についての計算機実験による研究..... 58
東北大学金属材料研究所 関口隆史
電子技術総合研究所 織田望
28. 希土類永久磁石関連化合物の強磁場磁化過程と結晶場相互作用... 59
東北大学工学部 加藤宏朗
東北大学金属材料研究所 小出知昭、本河光博
29. 2サイト相関を考慮した複合演算子法による2次元 t-J モデルの..... 61
電子状態の解析
東北大学金属材料研究所 西川泰一郎、松本秀樹
30. 6次元最大エントロピー法で決定した Zn-Mg-Y 準結晶の電子密度... 62
無機材料研究所 山本昭二
東北大学金属材料研究所 平賀賢二
31. 遷移金属酸化物の電子状態..... 63
東北大学金属材料研究所 松本秀樹

III. 論文リスト

[1].1994 年

1. An application of classical molecular dynamics simulation and..... 65
ab-initio density-functional calculation in surface physics
Molecular Simulation, Vol.12 (1994) pp.271-289
H. Rafii-Tabar, H. Kamiyama, Y. Maruyama, K. Ohno and Y. Kawazoe
2. Effects of molecular orientation on the electronic structure of fcc C₆₀.... 84
Phys. Rev. B49, (1994) pp.16202-16206
Bing-Lin Gu, Yutaka Maruyama, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and
Yoshiyuki Kawazoe
3. Ab-initio mixed-basis molecular dynamics simulation..... 89
applied to carbon microclusters
Trans. Mat. Res. Soc. Jpn., 14B (1994) pp.1215 - 1218
Y. Maruyama, H. Kamiyama, K. Ohno and Y. Kawazoe
4. Theory of the Capping Effect in Magnetic Double-Film Systems..... 93
Phys. Rev. B, 49 (1994) pp.3294-3302
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
5. Phase Transitions in Coupled Double-Layer Systems..... 102
J. Appl. Phys., 75 (1994) pp.6486-6488
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
6. Electronic Properties and Formation Mechanism of..... 105
Metallo Carbohedrenes
MRS Symposium Proceedings, Vol.349: Novel Forms of
Carbon II (1994) pp.221-224
Yoshiyuki Kawazoe, Bing-Lin Gu, Mark van Schilfgaarde, Jing-Zhi Yu
And Kaoru Ohno

7. The Effects of Molecular Orientation on the Electronic Structure of the··· 109
Solid Fullerites
MRS Symposium Proceedings, Vol.349: Novel Forms of
Carbon II (1994) pp.289-294
Bing-Lin Gu, Yutaka Maruyama, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno
and Yoshiyuki Kawazoe

8. Electronic Properties of C₅₈BN Fullerenes·········· 115
MRS Symposium Proceedings, Vol.349: Novel Forms of
Carbon II (1994) pp.225-230
Keivan Esfarjani, Bing-Lin Gu, Yutaka Maruyama, Kaoru Ohno and
Yoshiyuki Kawazoe

9. A Dynamic model of III–V Ternary Semiconductor Alloys in the····· 121
Epitaxial Growth
MRS Symposium Proceedings, Vol.340:
Compound Semiconductor Epitaxy (1994) pp.111-116
Bing-Lin Gu, Jing-Zhi Yu, Xiao Hu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

10. Band structure and chemical bonding in C₅₈BN heterofullerenes······ 127
Phys. Rev. B, 50 (1994) pp.17830-17836
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

11. Capability of intensity discrimination in multiple receptor model of···· 134
insect taste
Chem. Senses, 19 (1994) pp.317-329
Mitsuyuki Nakao, Yoshiyuki Kawazoe and Ichiro Shimada

12. How does mean-field theory work in magnetic multilayer systems? ··· 147
J. Appl. Phys., 76 (1994) pp.7108-7110
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

13. Mean-field theory for critical phenomena in bilayer systems·········· 150
Phys. Rev. B, 50 (1994) pp.12647-12658
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

14. An MD simulation of interactions between self-interstitial atoms..... 162
and edge dislocation in bcc transition metals
J. Nucl. Mater., Vol.212-215 (1994) pp.231-235
H. Kamiyama, H. Rafii-Tabar, Y. Kawazoe and H. Matsui

15. Commensurate-incommensurate phase transition in the presence of..... 167
crystal deformation
Phys. Rev. B, 50 (1994) pp.16173-16183
K.Parlinski, Y.Watanabe, K.Ohno and Y.Kawazoe

16. Real-time simulation on thermomagnetic recording..... 178
J. Magn. Magn. Mater., 132 (1994) pp.375-383
Shigeru Honma, Xiao Hu, Takehiko Yorozu, Yoshiyuki Kawazoe,
Tatsuya Imazu, Norio Ohta

17. Atomistic computer simulation for liquid-glass transition in Zr-Ni alloy.. 187
Materials Science and Engineering, A179/180 (1994) pp.256-260
Tomoyasu Aihara, Jr., Kiyoshi Aoki and Tsuyoshi Masumoto

18. Co/Pt/Gd/Pt 人工格子の層間結合と磁化過程..... 192
日本応用磁気学会誌, 18 (1994) pp.375-380
高梨弘毅、大場正志、黒川宣幸、藤森啓安

19. Freezing of Systems Interacting through Inverse-Power Potentials..... 198
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 63 (1994) pp.2215-2224
Masayuki Hasegawa

20. Fullerenes on Metal and Semiconductor Surface: Scanning Tunneling... 208
Microscopy Studies
Modern Physics Letters B, Vol.8 (1994) pp.1597-1626
Xiang-Dong Wang, T.Hashizume and T.Sakurai

21. Imaging of C₇₀ Intramolecular Structures with Scanning Tunneling..... 238
Microscopy
Phys.Rev. B, Vol.49 (1994) pp.14746-14749
X.-D. Wang, V.Yu. Yurov, T. Hashizume, H. Shinohara and T. Sakurai

22. 木版刷チベット文献中の文字特徴抽出…………… 242
印度學佛教學研究、第 42 卷第 2 号(1994) pp.866-869
小島正美、秋山庸子、川添良幸、木村正行
23. オブジェクト指向設計によるチベット文字認識について…………… 246
人文科学とコンピュータ、23-2 (1994) pp.9-15
小島正美、布宮千夏子、川村隆庸、秋山庸子、川添良幸、木村正行
24. マルチメディアと日本語教育…………… 253
人文科学とコンピュータ、23-8 (1994) pp.57-62
川添良幸、才田いずみ

[2].1995 年

1. Mechanism of commensurate $k=1/3$ -incommensurate phase transition··· 259
Comp. Mater. Sci., 3(1995) pp.439-447
K. Parlinski, K. Ohno and Y. Kawazoe
2. Calculations on the magnetic properties of rhodium clusters····· 268
J. Phys. Condens. Matter, 7(1995) pp.47-53
Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
3. Magnetic phase transitions and scaling of critical point in multilayer····· 275
systems
J. Magn. Soc. Jpn., 19S1 (1995) pp.45-48
X. Hu, M. Takahashi and Y. Kawazoe
4. Mean-field theory for spin-reorientation phase transitions in magnetic····· 279
thin films
Phys. Rev. B, 51(1995) pp.311-315
Xiao-Hu and Yoshiyuki Kawazoe
5. Quantum model for the superlattices with perpendicular and····· 284
in-plane easy axes ferromagnets
J. Magn. Soc. Jpn., 19S1 (1995) pp.447-451
R. Tao, X. Hu and Y. Kawazoe
6. CBT Approach to Quantum Spin Systems····· 288
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.219-223
Ruibao Tao, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
7. A New Method to Calculate Critical Field and Magnetic Configuration··· 293
in Multilayer System
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.287-290
Xiao Hu, Ruibao Tao and Yoshiyuki Kawazoe
8. Electronic states and stability of selenium clusters····· 297
Phys. Rev. B, 52 (1995) pp.1524-1527
Z. Q. Li, J. Z. Yu, K. Ohno, B. L. Gu, R. Czajla, A. Kasuya,
Y. Nishina and Y. Kawazoe

9. Search for the Ground State of $C_{60}B_{10}$ 301
MRS Symposium Proceedings, 359 (1995) pp.229-233
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

10. Phase Stability and Site Substitution in Nb-Al Compounds 306
MRS Symposium Proceedings, 364 (1995) pp.1111-1116
M. Sluiter, M. Takahashi and Y. Kawazoe

11. Site Preference of Ternary Additions in Ni_3Al 312
Phys. Rev. B, 51 (1995) pp.4062-4073
Marcel H.F. Sluiter and Y. Kawazoe

12. Electronic and magnetic structures in Fe/Co and Fe/Ni multilayer systems • 324
MORIS'94 (The Magnetic Society of Japan, Special Issue)
J.Magn.Soc.Jpn., 19, Supplement No. S1 (1995) pp.197-200
M. Takahashi, X. Hu and Y. Kawazoe

13. Definition of Phases and Transitions among Them 328
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.307-308
Yoshiyuki Kawazoe

14. Magnetism of Free and Embedded Rhodium Clusters 330
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.297-300
Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

15. Magnetism and Chemical Interactions in Metallic Alloys 334
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.301-306
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe

16. Electronic structures of C_{60} and C_{70} adsorbed on Cu(111) surface 340
and intramolecular STM images
Phys. Rev. B, 52 (1995) pp.2070-2075
Yutaka Maruyama, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

17. Electronic and magnetic properties of embedded Rh clusters in 346
Ni matrix
J. Phys.: Condens. Matter, 7 (1995) pp.7367-7372
Zhi-Qiang Li, Yuichi Hashi, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and
Yoshiyuki Kawazoe

18. Annealing of tweed microstructure in high T_c superconductors in..... 352
the presence of impurities
J. Mater. Res., 10 (1995) pp.1864-1871
K.Parlinski, Y.Watanabe, K.Ohno and Y.Kawazoe
19. Lattice model for exchange-coupled ferromagnetic multilayer systems... 360
Phys. Rev. B, 52 (1995) pp.6178-6180
Ruibao Tao, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
20. A bilayer of wigner crystal in the harmonic approximation..... 363
J.Phys Condens. Matter, 7(1995) pp.7217-7226
Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
21. Molecular dynamics study for structure and dynamics of amorphous and• 373
liquid $Zr_{67}Ni_{33}$ alloys
Sci. Rep. RITU, A41(1995) pp.1-8
Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
22. Molecular dynamics study of structural relaxation and..... 381
dynamical correlations in amorphous and liquid $Zr_{67}Ni_{33}$ alloys
Mater. Trans., JIM, 36(1995) pp.835-841
Tomoyasu Aihara, Jr, Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
23. Hyperfine fields and electronic structures in Fe/Co and..... 388
Fe/Ni multilayer systems
Sci. Rep. RITU, A40 (1995) pp.291-295
Manabu Takahashi, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
24. Dynamic model of epitaxial growth in ternary III-V semiconductor..... 393
alloys
Phys. Rev. B, 51 (1995) pp.7104-7111
Bing-Lin Gu, Zhi-Feng Huang, Jun Ni, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno
and Yoshiyuki Kawazoe
25. Anisotropy, Exchange Coupling and Phase Transition in..... 401
Magnetic Bilayer Systems
Scripta Metallurgica et Materialia, 33 (1995) pp.1841-1847
Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

26. Site occupation reversal in the Fe-Cr σ phase..... 408
 Phys. Rev. Lett., 75 (1995) pp.3142-3145
 Marcel.H. F. Sluiter, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
27. Energetics and structures of small benzene clusters..... 412
 Comp. Mater. Sci., 4 (1995) pp.241-248
 Zhi-Qiang Li, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe, Masuhiro Mikami and
 Yuji Masuda
28. Magnetic structures in nonmag-/mag-/nonmag-netic sandwiches..... 420
 MRS Symposium Proceedings, Vol.384 (1995) pp.227-231
 Yoshiyuki Kawazoe and Xiao Hu
29. Studies on magnetic configurations in multilayers by..... 425
 a quantum spin model
 MRS Symposium Proceedings, Vol.384 (1995) pp.265-270
 Yoshiyuki Kawazoe, Manabu Takahashi, Xiao Hu and Ruibao Tao
30. Magnetic properties of embedded Rh clusters in Ni matrix..... 431
 MRS Symposium Proceedings, Vol.384 (1995) pp.535-540
 Zhi-Qiang Li, Yuichi Hashi, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki
 Kawazoe
31. Band Structure and Structural Stability of the high-pressure phases of..... 437
 the group VIb Elements
 J. Phys. Chem. Solids, Vol.56, No.3/4 (1995) pp.551-554
 Atsushi Nishikawa, Komajiro Niizeki, Koichi Shindo
 and Kaoru Ohno
32. Considerations on Growth Parameters for Dynamic Congruent-State..... 441
 Growth of LiNbO₃
 Jpn. J. Appl.Phys., Vol.34 (1995) pp.5360-5363
 Satoshi Uda, Kiyoshi Shimamura and Tsuguo Fukuda
33. Intrinsic LiNbO₃ melt species partitioning at the congruent melt..... 445
 composition III Choice of the growth parameters for the dynamic
 congruent-state growth
 Journal of Crystal Growth, 155 (1995) pp.229-239
 Satoshi Uda, Kiyoshi Shimamura and Tsuguo Fukuda

34. Dispersion of collective excitations of amorphous and liquid $Zr_{67}Ni_{33}$ alloys 456
 J.Phys.: Condens. Matter, 7 (1995) pp.1525-1541
 Tomoyasu Aihara, Jr. and Tsuyoshi Masumoto
35. Molecular Dynamics Study on Vibrational Motion of Amorphous and Liquid $Zr_{67}Ni_{33}$ Alloys 473
 Materials Transaction JIM, Vol.36, No3 (1995) pp.399-407
 Tomoyasu Aihara, Jr., Kiyoshi Aoki and Tsuyoshi Masumoto
36. Damage-induced Luminescence in InP 482
 Appl. Phys. Lett., 67 [25] (1995) pp.3777-3779
 T.Sekiguchi and H.S.Leipner
37. Freezing of the Hard Spheres: Re-Examination of the Weighted-Density-Functional Theories 485
 Journal of Physical Society of Japan, Vol.64 (1995) pp.4242-4247
 Masayuki Hasegawa
38. Thermodynamic Perturbation Approach to Freezing of the Classical One-Component Plasma 491
 Journal of Physical Society of Japan, Vol.64 (1995) pp.4248-4257
 Masayuki Hasegawa
39. Energy and chemical potential in the two-dimensional Hubbard model 501
 Physica C, 250 (1995) pp.184-190
 F. Mancini, S. Marra and H. Matsumoto
40. Doping dependence of on-site quantities in the two-dimensional Hubbard model 508
 Physica C, 244 (1995) pp.49-53
 F. Mancini, S. Marra and H. Matsumoto
41. Density Functional Theory of Freezing of Soft-Core Systems 513
 Sci.Rep RITU, A40 (1995) pp.309-312
 Masayuki Hasegawa

42. Efficient Parallelized Simulation of Complicated Polymer Structure..... 517
Proc. Int. Symp.on Parallel and Distributed Supercomputing (1995) pp.270-276
Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Masayuki Kimura and Yoshiyuki Kawazoe
43. スーパーコンピューティングシステム利用のためのネットワークシステム... 524
技術研究報告 第 16 号(1995) pp.1-5
中名生充、秋山庸子、伊藤敏行、和田繁男、森倫子、余京智
大野かおる、川添良幸
44. 金属材料研究所材料データベースシステムの開発..... 529
技術研究報告 第 16 号(1995) pp.7-12
伊藤敏行、中名生充、秋山庸子、和田繁男、森倫子、余京智、大野かおる、
中道琢郎、川添良幸
45. 金属材料研究所材料データベースシステム支援プログラムの開発..... 535
技術研究報告 第 16 号(1995) pp.13-16
伊藤敏行、中名生充、秋山庸子、和田繁男、森倫子、余京智、大野かおる、
中道琢郎、川添良幸
46. Object Oriented Designing for Recognition of Tibetan Characters..... 539
東北工業大学情報処理技術研究所研究報告、Vol.8 (1995) pp.61-75
Chikako Nunomiya, Masami Kojima, Takanobu Kawamura, Youko Akiyama,
Yoshiyuki Kawazoe and Masayuki Kimura
47. オブジェクト指向設計によるチベット活字辞書を用いた類似文字認識... 554
情報処理学会論文誌、第 36 巻第 11 号 (1995) pp.2611-2621
小島正美、布宮千夏子、川村隆庸、秋山庸子、川添良幸
48. オブジェクト指向設計によるアモルファス合金形成領域検出法..... 565
情報知識学会誌、Vol.5 No.2 (1995) pp.49-55
小島正美、中名生充、秋山庸子、伊藤敏行、和田繁男、森倫子、
余京智、大野かおる、川添良幸
49. Site Preference of Ternary Additions in Ni₃Si..... 572
Mat..Res. Soc. Symp. Proc., Vol.364 (1995) pp.1065-1069
M. Sluiter and Y. Kawazoe

50. Hyperfine Fields and Electronic Structures in Fe/Co and Fe/Ni..... 577
Multilayer Systems
Solid State Communications, Vol.95 (1995) pp.127-130
Manabu Takahashi, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

[3].1996 年

1. Effect of Orientation on the band structure of $C_{58}BN$ Hetero-Fullerenes in fcc Solid Phase 581
Solid State Communications, Vol.97 (1996) pp.539-542
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno, Yoshiyuki Kawazoe and Bing-Lin Gu
2. First-Principles calculation of the pressure dependence of phase equilibria in the Al-Li system 585
Phys. Rev. B, Vol.53 (1996) pp.6137-6151
Marcel H. F. Sluiter, Y. Watanabe, D. de Fontaine and Y. Kawazoe
3. Etchant and probabilistic ballistic models of diamond growth 600
Phys. Rev. E, Vol.53 (1996) pp.148-156
M. Itoh, R. Sahara, M. Takahashi, X. Hu, K. Ohno and Y. Kawazoe
4. Heat and Mass Transfer during Crystal Growth 609
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.107-112
K. Kakimoto
5. Molecular Dynamics Simulation of Phase Separation in Lennard-Jones Liquids 615
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.89-96
Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
6. Prediction of Matrix-Precipitate Interfacial Free Energies: Application to Al- Al_3Li 623
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.97-101
Marcel Sluiter, Mark Asta, and Yoshiyuki Kawazoe
7. Electronic Structure of NaCl Type FeN 628
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.141-144
M. Takahashi and Y. Kawazoe
8. Strong Correlation of Electrons in Mesoscopic Ring under Magnetic Field 632
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.145-148
Hao Chen, Masahito Ishihara, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe

9. Ultra-high Density Magnetic Recording Media Using 2D and..... 636
3D Magnetic Anisotropic Artificial Lattices
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.149-152
Hiroshi Mizuseki, Masahito Ishihara and Yoshiyuki Kawazoe
10. Study of fcc and bcc Based Phases in the Al-Ag System..... 640
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.153-155
Jing-Zhi Yu, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
11. Tight-binding Molecular Dynamics Simulation of..... 643
Fullerene Collision Processes
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.171-173
Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
12. Ab-initio Molecular Dynamics Simulation of Water Clusters..... 646
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.175-182
Tamio Ikeshoji, Tomoyasu Aihara, Jr., Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
13. Ab-initio Molecular Dyanmics Simulation of Li Insertion in C₆₀..... 654
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.183-186
Yutaka Maruyama, Kaoru Ohno, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe
14. Classical MD Simulation of C₆₀ Adsorbed on GaAs(001) Surface..... 658
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.187-190
Hiroshi Kamiyama, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
15. Structure and Magnetism of Iron-Sulfur Clusters..... 662
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.211-214
Zhi-Qiang Li, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
16. Does Rigid C₆₀ Have a Liquid Phase? –Density Functional Theory–..... 666
Sci. Rep. RITU, A41 (1996) pp.103-106
Masayuki Hasegawa and Kaoru Ohno
17. Lattice distortion and magnetism of Fe impurity in Cu and Ag..... 670
Materials Transactions JIM, Vol.37 (1996) pp.279-282
Yuichi Hashi, Zhi-Qiang Li, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe

18. Spin-Reorientation Transition in Superlattices by..... 674
 Large Scale Dynamic Simulation
 Materials Transactions JIM, Vol.37 (1996) pp.478-481
 Hirohi Mizuseki, Masahito Ishihara, Xiao Hu, Yuichi Hashi and
 Yoshiyuki Kawazoe

19. The Effect of Magnetism on the Site Preference in Ni₃Al..... 678
 Acta. Mater., Vol.44 (1996) pp.209-215
 Marcel H. F. Sluiter, M. Takahashi and Y. Kawazoe

20. Ab-initio Molecular Dynamics Simulations for Collision..... 685
 between C₆₀⁻ and Alkali-Metal Ions: A Possibility of Li@C₆₀
 Phys. Rev.Lett., Vol.76 (1996) pp.3590-3593
 Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama, Keivan Esfarjani and Yoshiyuki Kawazoe

21. Phase Stability under High-Pressure in two Precipitation Strengthened..... 689
 Alloys
 Materials Transactions JIM, Vol.37 (1996) pp.663-669
 Marcel H.F.Sluiter, Y.Watanabe and Y.Kawazoe

22. Molecular Dynamics Simulation for the Formation of Magic Number..... 696
 Clusters with a Lennard-Jones Potential
 Phys.Rev.Lett., Vol.76 (1996) pp.1792-1795
 Tamio Ikeshoji, Bjørn Hafskjold, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe

23. New Estimation of Surface Anisotropy..... 700
 J.Appl.Phys., Vol.79 (1996) pp.5842-5844
 Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

24. Study of coupled Ferromagnetic thin film and semi-infinite bulk..... 703
 Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 153 (1996) pp.380-388
 Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe

25. Monte Carlo Study of the Second Virial Coefficient of..... 712
 Star Polymeres in a Good Solvent
 Macromolecules, Vol.29 (1996) pp.2269-2274
 Kaoru Ohno, Kazuhito Shida, Masayuki Kimura and Yoshiyuki Kawazoe

26. Molecular Dynamics Study of Structural and Dynamical Properties of Zr_xNi_{100-x} ($x=0\sim 100$) Amorphous and Liquid Alloys
Sci. Rep. RITU, A42 (1996) pp.57-63
Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto 718
27. Stability and reactivity of C_{60} studied by all-electron mixed-basis molecular-dynamics simulations at finite temperatures
Phys.Rev. B, Vol.53 (1996) pp.4078-4082
K.Ohno, Y.Maruyama and Y.Kawazoe 725
28. Structures of benzene Clusters
Surface Review and Letters, Vol.3 (1996) pp.359-363
Zhi Qiang Li, Kaoru Ohno, and Yoshiyuki Kawazoe 730
29. Electronic Structure of C_{60} Simple Cubic Phase by full-potential mixed-basis Band Calculation
Surface Review and Letters, Vol.3 (1996) pp.735-740
Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama, Manabu Takahashi, Jing-Zhi Yu, Bing-Lin Gu and Yoshiyuki Kawazoe 735
30. Electronic Properties of $C_{58}BN$ Heterofullerenes
Surface Review and Letters, Vol.3 (1996) pp.747-752
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe 741
31. Electronic Structure and STM Image of C_{60} - C_{70} Adsorbed on the Cu(111) Surface
Surface Review and Letters, Vol.3 (1996) pp.923-926
Yutaka Maruyama, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe 747
32. Molecular dynamics simulation of observed $c(4\times 4)$ and $c(4\times 3)$ C_{60} alignments on the Si(100) reconstructed surface
Modeling Simul. Mater. Sci. Eng., 4 (1996) pp.101-110
H. Rafei-Tabar, A. L. TambyRajah, H. Kamiyama and Y. Kawazoe 751

33. Molecular dynamics study for diffusion process in amorphous and..... 760
supercooled liquid $Zr_{67}Ni_{33}$ alloys
Materials Science &Engineering, B37 (1996) pp.201-204
Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
34. Molecular Dynamics Study on Grain Boundary in..... 764
Intermetallic Compound The International Conference on
Modelling and Simulation in Metallurgical
Engineering and Materials Science, (1996) pp.33-37
Tomoyasu Aihara, Jr., Tsuyoshi Masumoto , and Yoshiyuki Kawazoe

IV. 予稿集リスト

[1].1994 年

1. ダイヤモンド薄膜成長のエッチング粒子を含むバリステック..... 769
凝集モデル
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.8
伊藤未丈、胡曉、高橋学、大野かおる、川添良幸
2. Cu(111)基板表面上に整列吸着した C_{60} 及び C_{70} の電子状態計算..... 769
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.254
丸山豊、大野かおる、川添良幸
3. Se_6 クラスターの構造と電子状態..... 769
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.254
川添良幸、余京智、大野かおる、李志強、顧秉林
4. Molecular-Dynamics Simulation of Incommensurate Phase..... 770
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.345
K. Parlinski
5. III - V 三元半導体合金のエピタキシャル成長モデル..... 770
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.388
川添良幸、余京智、大野かおる、顧秉林
6. 置換型合金における二次規制課..... 770
第 114 回日本金属学会 1994 年春季 No.858
マーセル・スライター、余京智、川添良幸
7. BCC 金属中の格子間原子運動と転移バイアスの MD 法による研究..... 771
第 115 回日本金属学会 1994 年秋季 No.209
神山博、H. Rafii-TABAR、川添良幸、松井秀樹
8. ダイヤモンド成長過程のエッチング粒子を含む 3 次元バリステック..... 771
凝集モデル
第 115 回日本金属学会 1994 年秋季 No.328
伊藤未丈、高橋学、胡曉、大野かおる、川添良幸

9. 金属化合物の結晶粒界の分子動力学シミュレーション..... 771
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.485
相原智康、青木清、川添良幸、増本健
10. 不純物を含む高温超伝導体のマイクロ構造の分子動力学シミュレーション・ 772
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.512
渡辺貴郎、K. PARLINSKI、大野かおる、川添良幸
11. Prediction of Site Preference in Intermetallics from..... 772
Supercell Calculations
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.564
Marcel Sluiter, Manabu Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
12. Site Preference of Ternary Addition in Ni₃Al..... 772
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.565
Marcel SLUITER, Manabu TAKAHASHI, Jing-Zhi YU and Yoshiyuki
KAWAZOE
13. 第一原理分子動力学法による炭素クラスターの成果過程の..... 773
シミュレーション
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.735
丸山豊、大野かおる、川添良幸
14. C₆₀ 結晶の回転相転移に伴う電子状態変化に関する..... 773
第一原理バンド計算
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.736
大野かおる、余京智、高橋学、川添良幸、丸山豊、顧秉林
15. 第一原理バンド計算による C₇₀ 結晶の fcc 相と hpc 相の電子状態..... 773
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.737
余京智、大野かおる、川添良幸、丸山豊、顧秉林
16. Si(100)表面における C₆₀ 分子の c(4×3)及び c(4×4)構造の..... 774
形成過程の大規模 MD シミュレーション
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.868
神山博、H. Rafii-TABAR、大野かおる、川添良幸

17. オブジェクト指向 DB によるアモルファス形成率予測..... 774
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.924
中名生充、余京智、伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、森倫子、
大野かおる、川添良幸、蔡安邦、増本健、小島正美
18. アモルファスおよび液体合金の構造変化に関する分子動力学..... 774
シミュレーション
第 115 回日本金属学会 1994 秋季 No.924
相原智康、青木清、増本健
19. 材料化学研究とスーパーコンピューティング..... 775
東北大学金属材料研究所第 88 回講演会 1994 年春季 p.19
川添良幸、大野かおる、胡曉、高橋学、Keivan Esfarjani
20. Evolution of Microstructure and Incommensurate Patterns..... 776
東北大学金属材料研究所第 88 回講演会 1994 年春季 p.20
K. Parlinski
21. 炭素クラスター生成過程の第一原理分子動力学シミュレーション..... 777
第 7 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1994) p.136
丸山豊、大野かおる、川添良幸
22. フラーレンの吸着過程のコンピューターシミュレーション..... 778
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成 6 年度 p.133
川添良幸、H.Rlfii-Tabar、神山博
23. 水クラスターの形成過程の第一原理分子動力学による解析..... 779
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成 6 年度 pp.134-136
川添良幸、池庄司民夫
24. The Epitaxial Growth Model of - Ternary Semiconductor Alloys..... 782
MRS. 1994, Spring, E1.3
B. -L. Gu, J. -Z. Yu, L. Ohno and Y. Kawazoe

25. The Effects of Molecular Orientation on the Electronic Structure of..... 782
the Solid Fullerites
MRS. 1994, Spring, T7.10
Y. Maruyama, J. -Z. Yu, K. Ohno and Y. Kawazoe
26. Electronic Properties and Formation Mechanism of..... 783
Metallo-Carbohedrenes
MRS. 1994, Spring, T5.9
Y. Kawazoe, B. -L. Gu, Mark van Schilfgaarde, J.-Z. Yu and K. Ohno
27. Cohesive Energy and Electronic Properties of $C_{58}NB$ Fullerenes..... 783
RS. 1994, Spring, T5.10
Keivan Esfarjani, Bing-Lin Gu, Yutaka Maruyama, Kaoru Ohno and
Yoshiyuki Kawazoe
28. Cohesive Energy, Electronic Structure and Stability of The $C_{60}B_{10}$ 784
Fullerene
MRS. 1994, Fall, G4.3
Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
29. Site Preference of Ternary Additions in Ni_3Al 784
MRS. 1994, Fall, L4.33
Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
30. Modeling of Effect of Macroalloying on the Stability and..... 785
Ordering in Ni_3Si
MRS. 1994, Fall, L13.23
Marcel Sluiter. Jing-Zhi Yu and Yoshiyuki Kawazoe
31. Ternary Additions in $A15 Nb_3Al$ 785
MRS. 1994, Fall, L13.36
Marcel Sluiter, Manabu Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
32. 日本語学習のための音声学習支援システム..... 786
PC CPNFERENCE (1994) PP.72-73
才田いずみ、井口寧、川添良幸

[2].1995 年

1. 体心立方金属・合金におけるバイアス発生の機構…………… 788
第 116 回日本金属学会 1995 年春季 No.341
松井秀樹、川添良幸、神山博、H. Rafii-TABAR
2. V-Fe 合金中の転位と点欠陥の相互作用に関するコンピューター…………… 788
第 116 回日本金属学会 1995 年春季 No.342
神山博、H. Rafii-TABAR、川添良幸、松井秀樹
3. 第一原理分子動力学法によるフラレン生成機構の研究…………… 788
第 116 回日本金属学会 1995 年春季 No.692
丸山豊、大野かおる、川添良幸
4. 磁性多層膜および超格子における新しい物性…………… 789
第 116 回日本金属学会 1995 年春季 No.966
川添良幸、高橋学、胡曉
5. Fe/Co、Fe/Ni 多層膜の電子構造と Hyperfine Field…………… 789
第 116 回日本金属学会 1995 年春季 No.967
高橋学、胡曉、川添良幸
6. Magnetism of Nanoscale Fe Clusters in Cu and Ag Matrices…………… 790
第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.337
Zhi-Qiang LI, Yuichi HASHI, Kaoru OHNO and Yoshiyuki KAWAZOE
7. Spin Reorientation Transition in Superlattices by Large Scale…………… 790
第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.338
Hiroshi MIZUSEKI, Masahito ISHIHARA, Xiao HU, Yuichi HASHI and
Yoshiyuki KAWAZOE
8. Molecular Dynamics Study of Atomic Interaction Effect on…………… 790
Binary Liquid System
第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.629
Tomoyasu AIHARA, Jr., Yoshiyuki KAWAZOE and Tsuyoshi MASUMOTO

9. Electronic States of Hexagonal C₆₀ Heptamer: Comparison with····· 791
 STM Image on Si
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1268
 Kaoru OHNO, Yutaka MARUYAMA, Keivan ESFAEJANI,
 Yoshiyuki KAWAZOE, C. -W.HU, A. KASUYA and Yuichiro NISHINA
10. Lattice Distortion Effects on the Magnetism of Fe Impurity in Cu and····· 791
 Ag Matrices
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1269
 Yuidhi HASHI, Zhi-Qiang, LI, Kaoru OHNO and Yoshiyuki KAWAZOE
11. Study of fcc, bcc and hcp Based Phases in the Al-Ag System····· 791
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1270
 Jing- Zhi Yu, Marcel SLUITER and Yoshiyuki KAWAZOE
12. Phase Stability under High-Pressure in two Precipitation····· 792
 Strengthened Alloys
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1283
 Marcel SLUITER, Yoshi WATANABE and Yoshiyuki KAWAZOE
13. Study of occupation in FeCr and FeV σ phase····· 792
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1285
 Marcel SLUITER, Keivan ESFARJANI and Yoshiyuki KAWAZOE
14. A Study of Atomistically Controlled New Materials in Nano-scale by····· 792
 Computer Simulation
 第 117 回日本金属学会 1995 年秋季 No.1286
 Yoshiyuki KAWAZOE
15. レーザー上輻射場における単一石灰チャー粒子燃焼を影響する····· 793
 諸因子の非定常燃焼モデルによる考察
 CAMP-ISJI Vol.8 (1995) p.963
 屈 明昌、石垣政祐、徳田昌則、余京智、川添良幸
16. レーザー上輻射場における単一石灰チャー粒子の非定常燃焼モデル··· 794
 CAMP-ISJI Vol.8 (1995) p.964
 屈 明昌、石垣政祐、徳田昌則、余京智、川添良幸

17. Lowest energy configuration of $C_{60}B_{10}$ 795
第 8 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集(1995) pp.176-180
Keivan Esfarjani、大野かおる、川添良幸
18. C_{60}, C_{70} 結晶の相転移と電子状態..... 800
第 8 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集(1995) pp.152-153
大野かおる、余京智、丸山豊、高橋学、川添良幸
19. 全電子混合基底第一原理バンド計算および分子動力学法による..... 802
炭素分子およびフラーレン結晶物性の詳細解析
第 8 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集(1995) pp.143-146
川添良幸
20. 全電子混合基底第一原理バンド計算による $Cu(111)$ 面上に列した..... 806
 C_{60} および C_{70} の電子状態
第 7 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集(1994) pp.250-254
大野かおる、丸山豊、余京智、顧乗林、川添良幸
21. 炭素マイクロラスターの電子状態・振動状態に関する第一原理的研究・・ 811
文部省重点領域研究「炭素クラスター」第 2 回研究成果
中間報告書(1995) pp.107-109
大野かおる、胡曉、高橋学、進藤浩一、川添良幸
22. Hyperfine Field and Electronic Structure in Fe/Co and Fe/Ni Multilayer・・ 814
Systems
MRS. 1995. Spring G7.7
Manabu Takahashi, Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
23. Magnetic Structures in Nonmag-/Mag-/Nomag-netic Sandwiches..... 814
MRS. 1995. Spring G7.6
Yoshiyuki Kawazoe and Xiao Hu
24. Magnetic of Embedded Rhodium Clusters..... 815
MRS. 1995. Spring L8.11
Zhi-Qiang Li, Yuichi Hashi, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno and Yoshiyuki
Kawazoe

25. Phase Stability of the Sigma Phase in Fe-Cr based alloys..... 815
MRS. 1995. Fall. P16.21
M. Sluiter, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
26. Ab-initio Calculation of Inter-Phase Boundary..... 816
Thermodynamic Properties
MRS. 1995. Fall. W7.2
M. Sluiter and Y. Kawazoe
27. Stabilities of Al_{13}^- Cluster by Ab-initio MD Study..... 816
MRS. 1995. Fall.W8.1
Y. Maruyama, K. Ohno and Y. Kawazoe
28. Simulation of Electron Transport Through Quantum dot with..... 817
Dilute Magnetic Impurities
MRS. 1995. Fall.W8.26
Hao Chen, Masahito Ishihara and Yoshiyuki Kawazoe
29. Dynamical Behavior of Tilt Grain Boundary in Ni_3Al at..... 817
Finite Temperature
MRS. 1995. Fall.W8.34
Tomoyasu Aihara, Tsuyoshi Masumoto and Yoshiyuki Kawazoe
30. BCC 合金中の転位と点欠陥の相互作用およびボイド形成過程の..... 818
コンピューター・シミュレーション
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.149
松井秀樹、神山博、川添良幸、H.ラフィー・タバール
31. 炭材粒子の燃焼反応の計算機シミュレーション..... 819
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.249
川添良幸、余京智、徳田昌則、石垣政裕、屈明昌
32. マイクロクラスターのコンピューターシミュレーション..... 820
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.251
川添良幸、大野かおる、近藤保、寺寄亨、市橋正彦

33. 金属クラスターのスパッタリングにより作製された合金の..... 821
 コンピューターシミュレーション
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.25
 川添良幸、神山博、相原智康
34. 水クラスターの形成過程の第一原理分子動力学による解析..... 822
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 pp.253-255
 川添良幸、池庄司民夫
35. 磁性体のランダム磁場効果..... 825
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.256
 岡部豊、川勝年洋、大塚博巳、大野かおる
36. 異方性結晶ならびに非晶質の構造に関する分子動力学的研究..... 826
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.257
 小川浩、相原智康、増本健
37. 固相-液相転移の理論的研究..... 827
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 p.258
 長谷川正之、大野かおる
38. 超微粒子・表面・界面のダイナミクスと物性..... 828
 東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告 平成7年度 pp.305-308
 川添良幸、大野かおる
39. Ab-initio Molecular Dynamics Simulation of Dimerization of C₆₀..... 832
 第9回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1995) pp.203-206
 大野かおる、丸山豊、川添良幸
40. Effect of orientation of C₅₈BN hetero-fullerenes on their..... 836
 band structure in the fcc solid phase
 第9回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1995) pp.207-209
 Keivan Esfarjani, Kaoru Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
41. Electronic States in Dimerized C₆₀ on Si(111) Surface..... 839
 第9回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1995) pp.210-212
 胡長武、粕谷厚生、仁科雄一郎、大野かおる、丸山豊、川添良幸

42. Ab-initio molecular dynamics simulation of the formation process of····· 842
alkali-metal encapsulated C₆₀
第9回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1995) pp.213-216
大野かおる、丸山豊、川添良幸、佐藤徳芳、畠山力三、平田孝道、
庭野道夫
43. Cu(111) 表面上の C₆₀, C₇₀ の電子状態と分子内分解能を持つ STM 像·· 846
炭素クラスター 季刊フラーレン Vol.3 (1995) p.26
Y. Maruyama, K. Ohno and Y.Kawazoe
44. Magnetism of Nanoscale Fe clusters in Cu and Ag matrices·········· 847
NCGM. (1995) p.9
Yoshiyuki Kawazoe, Zhi-Qiang Li and Yuichi Hashi
45. Ab-initio MD Study of Stability and Reactivity of C₆₀·········· 848
NCGM. (1995) p.45
Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama and Yoshiyuki Kawazoe
46. シミュレーションによるナノ構造材料設計·········· 849
東北大学金属材料研究所 第66回夏季講習会 (1995) pp.10-1 ~ 10-10
川添良幸
47. 物質研究における計算機シミュレーション·········· 862
東北大学金属材料研究所 第90回講演会 1995年春季 p.6
大野かおる
48. MD Simulations of Point Defect Behavior Near a Dislocation in········ 863
BCC Metals
Summary of presentation in US/Japan Workshop (1995) p.18
H.Matsui, H.Kamiyama, Y.Kawazoe, and H.Rafii-Tabar
49. ナノスケール材料設計用大規模コンピューターシミュレーションと······ 864
その結果のサイエンティフィックビジュアライゼーション
第6回日本ビジュアルニューメリックユーザ会コンファレンス
予稿集 (1995) pp.2-10
川添良幸

[3].1996 年

1. Zr-Ni 系アモルファス合金の変形と破壊に関する分子動力学..... 873
シミュレーション
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.95
相原智康、川添良幸、増本健
2. Al-Ag 二元系における相安定性に及ぼす圧力の影響..... 873
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.236
余京智、M.スラター、川添良幸
3. DLA成長における外乱の効果..... 873
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.292
水関博志、田中一美、胡曉、大野かおる、川添良幸
4. Si結晶成長を再現する多体力を考慮したモンテカルロ..... 874
シミュレーション
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.293
佐原亮二、水関博志、宇田聡、大野かおる、川添良幸
5. Positron Annihilation 2D-ACAR Study of Divacancies in Si..... 864
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.298
Z. TANG, T CHIBA, M. HASEGAWA, A.KAWASUSO, M. SUEZAWA,
S. Yamaguchi and K. SUMINO
6. Interaction between Conduction Electrons and Magnetic Impurities in..... 874
Quantum Dot
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.430
Hao CHEN
7. 磁気双極子の効果による3次元人工格子中の多値記録..... 875
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.561
石原正仁、水関博志、胡曉、川添良幸、太田憲雄
8. First-Principles Calculation of Inter Phase Boundary Energies..... 875
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.799
Marcel SLUITER and Yoshiyuki KAWAZOE

9. Structure and Magnetism of Iron-Sulfur Clusters..... 875
第 118 回日本金属学会 1996 年春期 No.823
Zhi-Qiang LI, Kaoru OHNO and Yoshiyuki KAWAZOE
10. 粒子の膨張と揮発分放出を考慮した単一石炭粒子の..... 876
非定常燃焼の解析
CAMP-ISIJ, Vol.9 (1996) pp.192
屈明昌、石垣政裕、徳田昌則、余京智、川添良幸
11. モンテカルロ・シミュレーションによる結晶成長の研究..... 877
東北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.5
川添良幸
12. 融液からのSi 結晶成長に対する近接原子の影響を考慮した..... 878
モンテカルロシミュレーション
東北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.14
水関博志、佐原亮二、宇田聡、大野かおる、福田承生、川添良幸
13. Harmonic and Anharmonic Vibrational Investigations in Pristine and..... 879
Charged C_{60}
東北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.15
R.T.Fu, J.Z.Yu, and Y.Kawazoe
14. 3次元磁性人工格子中の多値記憶..... 880
北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.16
石原正仁、水関博志、胡曉、川添良幸
15. 結晶ならびにアモルファス合金の変形と破壊に関する分子動力学..... 881
シミュレーション
東北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.17
相原智康、川添良幸
16. Adsorption of C_{60} on GaAs (001) 2×4 Surface: An ab initio Study..... 882
東北大学金属材料研究所第 92 回講演会 1996 年春季 p.18
Zhi-Oiang Li, Rong-tang Fu, and Yoshuki Kawazoe

17. Ab-initio Calculation of Inter-Phase Boundary..... 883
 Thermodynamic Properties
 MRS.1996.Spring. W7.2
 Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
18. Stability of Al_{13}^- Cluster by an Ab-initio MD Study..... 883
 MRS.1996.Spring. W8.1
 Y. Maruyama, K. Ohno and Y. Kawazoe
19. Simulation of Electron Transport Through Quantum Dot with..... 884
 Dilute Magnetic Impurities
 MRS.1996.Spring. W8.26
 Hao Chen, Masahito Ishihara and Yoshiyuki Kawazoe
20. Dynamical Behavior of Tilt Grain Boundary in Ni_3Al at..... 884
 Finite Temperature
 MRS.1996. Spring. W8.34
 Tomoyasu Aihara,Jr., Tsuyoshi Masumoto and Yoshiyuki Kawazoe
21. Magnetic Multi-Valued Recording by New Magnetic Configurations in..... 885
 2D and 3D Artificial Lattices
 Digests of Intermag (1996) FE-07
 H.Mizuseki, M.Ishihara, X.Hu, Y.Kawazoe and N.Ohta
22. Surface Anisotropy and Spin-Reorientation Transitions in Ultrathin..... 887
 Magnetic Films
 Digests of Intermag (1996) GE-02
 Xiao Hu and Yoshiyuki Kawazoe
23. Electronic structure of C_{240} rings..... 889
 日本 MRS シンポジウム (1996) No.IP36
 K. Esfarjani, Y. Hashi, S. Itoh, S. Ihara and Y. Kawazoe
24. Electronic Structure of Al_{13}^- Cluster by all Electron Mixed-Basis..... 889
 Approach
 日本 MRS シンポジウム (1996) No.T14
 Y. Maruyama, K. Ohno and Y. Kawazoe

25. Electronic Structure of C_{240} isomers..... 890
第 6 回計算化学シンポジウム(1996)pp.15-17
Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Satoshi Itoh, Shigeo Ihara and Yoshiyuki Kawazoe
26. 二元系 LJ 液体の相分離の分子動力学シミュレーション..... 893
第 9 回分子シミュレーション検討会 (1996) pp.101-102
相原智康、川添良幸、増本健
27. C_{60}^- とアルカリ金属イオンの衝突に対する第一原理的な分子動力学のシミュレーション: $Li@C_{60}$ の可能性..... 895
炭素クラスター季刊フラーレン Vol.4 (1996) p.69
Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama, Keivan Esfarjani, Yoshiyuki Kawazoe, Noriyoshi Sato, Rikizo Hatakeyama, and Takamichi Hirata
28. Electronic and vibrational properties of C_{240} fullerenes by the tight-binding method..... 896
第 11 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1996) p.213
K. Esfarjani, Y. Hashi, S. Itoh, S. Ihara and Y. Kawazoe
29. Vibrational modes of twice negatively charged C_{60} dimer..... 897
第 11 回フラーレン総合シンポジウム講演要旨集 (1996) p.214
Y. Hashi, K. Esfarjani, J. Onoe, K. Takeuchi, K. Kikuchi and Y. Kawazoe

V. 受賞記事

1. Cu(111)表面に生成した単分子膜におけるC₆₀内部構造のSTM像…… 899
日本金属学会金属組織写真奨励賞受賞
橋詰富博、王向東、甕久実、丸山豊、大野かおる、川添良幸、篠原久典、
仁科雄一郎、桜井利夫
2. 東北大学金属材料研究所データベースKINDの構築と提供…… 900
日本科学技術情報センター学術賞受賞
情報管理, Vol.37 No.4 (1994) pp282, 284, 286
川添良幸
3. 材料設計シミュレーション専用スーパーコンピューティング…… 904
システムの開発と評価
第32回 HITAC ユーザ研究会 大会論文集 (1995) pp.165-174
一般論文の部 優良賞受賞
川添良幸、大野かおる、余京智、中名生充、秋山庸子、伊藤敏行、
和田繁男、森 倫子
4. マルチメディア材料データベースと大規模シミュレーションの…… 915
インテグレーションによる材料設計システムの構築と
活用マシン提供型からサービス提供型, 更に生産型センターへの展開
第34回ユーザーシンポジウム論文 (1996) IBM 賞佳作受賞
川添良幸, 中名生充

VI. 雑誌掲載解説記事

1. C₆₀ 電子雲のサイエンティフィック・ビジュアライゼーション…………… 941
まてりあ 第33巻 第2号 (1994) pp.184-185
川添良幸
2. 材料科学のためのコンピューターネットワーク環境…………… 943
まてりあ 第33巻 第10号 (1994) pp.1241-1244
川添良幸
3. スーパーコンピューティングシステム運用開始にあたって…………… 947
IMRニュース No.19 (1994) pp.2-4
川添良幸
4. サンスクリット・チベット語文献のコンピュータによる総合的研究…………… 950
東北大学学報 第1373号別冊(1994) pp.15-16
川添良幸
5. 材料科学におけるサイエンティフィックビジュアライゼーション…………… 952
bit, Vol.27 (1995) pp.82-88
川添良幸
6. 材料科学におけるスーパーコンピューティング…………… 959
情報処理, Vol.36, No.2 (1995) pp.149-153
川添良幸
7. スーパーコンピュータサイト ―ドンガラレポート―…………… 964
bit Vol.27, No.7 (1995) pp.109-113
川添良幸、橋祐一
8. メモリー素子へ応用できるか…………… 969
化学 第50巻 6号 (1995) pp.360-361
川添良幸、大野かおる
9. 世紀末を乗り切れるか? …………… 971
BOUNDARY (1995.1) pp.24-26
川添良幸
10. インターネット いま論じておかなければ…………… 974
BOUNDARY (1995.3) pp.2-4
川添良幸

11. 金研で行った結晶成長の基礎研究 客員教授の任期を終えて…………… 977
IMRニュース No.23 (1995) pp.4-5
三菱マテリアル株式会社総合研究所 宇田聡
12. HOW TIME FLIES IN SENDAI…………… 979
IMRニュース No.23 (1995) pp.6-9
Marcel Sluiter (Brookheven National Lab.)
13. オブジェクト指向設計による木版刷チベット文献の文字認識に…………… 983
関する研究
重点領域「人文科学とコンピューター」研究情報誌 じんもんこん
第2号(1995) pp.45-46
小島正美、川添良幸、布宮千夏子、秋山庸子
14. SCIENTIFIC VISUALIZATION OF THE SIMULATED ELECTRON… 985
CLOUD IN C₆₀ BUCKYBALL WITH DX
Communique Data Explorer Newsletter Vol.3 (1995) pp.10-11
Professor Yoshiyuki Kawazoe
15. 多部門多目的データベース構築のための基礎的研究…………… 987
東北大学学報 第 1396 号別冊 (1995) pp.14-15
ネットワーク代表者 川添良幸
16. KIND:東北大学金属材料研究所 材料データベースの現状…………… 989
まてりあ 第 35 巻 第 6 号(1996)pp.700-703
川添良幸
17. 超微粒子・表面・界面のダイナミックスと物性…………… 993
IMR ニュース No.24 (1996) pp.25-28
川添良幸
18. 大規模コンピューターシミュレーションによる新素材設計と…………… 997
材料データベース構築
東北大学学報 第 1413 号 (1996) 研究紹介 pp.3-4
川添良幸

VII. 新聞記事

1. 河北新報 1994年4月16日(土)..... 999
2. 河北新報 1994年4月21日(木)..... 1000
東北大金研データベース・川添教授が東北で初の
日本科学技術情報センター学術賞受賞の記事
3. 河北新報 1994年5月26日(木)..... 1001
東北大学金研・スーパーコンピューター情報網完成記事
4. 科学新聞 1994年5月27日(金)..... 1002
東北大学金研・スーパーコンピューター稼働開始記事
5. 日刊工業新聞 1995年2月21日(火)..... 1004
アトムクラスター材料化研究・愛知県を拠点にする計画に関する記事
6. 毎日新聞 1995年6月21日(水)..... 1005
7. 朝日新聞 1995年6月22日(木)..... 1006
8. 読売新聞 1995年6月22日(木)..... 1007
9. 河北新報 1995年6月22日(木)..... 1008
川添教授、中国復旦大学の顧問教授に就任についての記事
10. 日本経済新聞 1996年3月23日(土)..... 1009
11. 河北新報 1996年3月23日(土)..... 1010
12. 日刊工業新聞 1996年3月25日(月)..... 1011
川添教授らの東北大学研究グループによる、金属内包フラーレン大量生
産の手法開発に関する記事

VIII. 雑誌記事

1. Digital News, No.57 Aug. (1994) p.9 LABO watching..... 1012
物質設計に、実験・理論に次ぐ第三の研究方法を築く
東北大学金属材料研究所・川添良幸教授

2. でんさ No.47 (1995) pp.1-6..... 1013
VISIT TO CLIENTS 「もっと広く、もっと深く」
スーパーコンピューティングへの期待は大きい。
東北大金研スーパーコンピューター棟紹介
3. 北斗七星 No.51 (1996) p.5-7..... 1018
学内散歩・東北大金研スーパーコンピューター棟紹介

IX. その他

1. スーパーコンピューター棟レイアウト図..... 1021
2. 本所情報委員会メンバー・学内情報関連委員..... 1023
3. 材料科学情報室長 川添教授の学内兼任・学外併任・委員等一覧..... 1024