

1996 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

(1996 年 4 月～1997 年 3 月)

目次

- I. はじめに
- II. 研究内容概要
 1. 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…………… 1
北陸先端科学技術大学大学院 志田和人、木村正行
東北大学金属材料研究所 大野かおる、川添良幸
 2. 過冷却液体ならびにアモルファスの応力下におけるダイナミックスと
力学的挙動…………… 5
東北大学金属材料研究所 相原智康、川添良幸
 3. タイトバインディング法による遷移金属クラスターの電子状態計算…………… 7
東北大学金属材料研究所 種田晃人、Keivan Esfarjani、李志強、
川添良幸
 4. モンテカルロ法によるシリコン融体の結晶化に関する 3 次元シミュレー
ション研究…………… 8
東北大学金属材料研究所 佐原亮二、水関博志、大野かおる、福田承生、
川添良幸
三菱マテリアル総合研究所 宇田聡
 5. Determination of Structures, Energetics, and Electronic Properties of Small
Urea Clusters by ab-initio Calculations…………… 11
Rodion V. Belosludov, Zhi-Qiang Li, and Yoshiyuki Kawazoe, Institute for
Materials Research, Tohoku Univ.
 6. The Three Fermion Problem Beyond the Born-Oppenheimer
Approximation…………… 12
Amir A.Farajian, Keivan Esfarjani, and Yoshiyuki Kawazoe,
Institute for Materials Research, Tohoku Univ.

7. ナノスケールで変化した傾斜構造の物理的・力学挙動の原子レベルシミュレーション..... 13
 東北大学金属材料研究所 正朋祥、相原智康、川添良幸
8. 有限濃度での電解析出シミュレーション..... 14
 東北大学金属材料研究所 水関博志、菊地圭子、田中一美、大野かおる、川添良幸
9. AVS を使った画像解析..... 17
 東北大学金属材料研究所 菊地圭子、田中一美、水関博志、石原正仁、恒川信、川添良幸
10. First-Principles Studies of One-dimensional Conducting Polymers..... 18
 C. Q. Wu and Y. Kawazoe, Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
11. First Principle Calculation of the Structural and the Magnetic Properties of Fe/Au and Cr/Au Monatomic Multilayers..... 20
 Jian-Tao WANG, Zhi-Qiang LI and Yoshiyuki KAWAZOE,
 Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
12. Ab initio studies on complex systems..... 23
 Z. Q. Li, S. Yamaguchi, K. Parlinski, K. Ohno and Y. Kawazoe
 Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
13. 全電子混合基底法の遷移金属への応用..... 25
 東北大学金属材料研究所 大野かおる、志賀圭一郎、付栄堂、川添良幸
 名古屋工業技術研究所 丸山豊
14. GGA 全電子混合基底法によるスモールクラスターの全エネルギー計算... 27
 東北大学金属材料研究所 志賀圭一郎、付栄堂、大野かおる、川添良幸
 名古屋工業技術研究所 丸山豊
15. 液体急冷法によるアモルファス相の形成し易い三元系合金の混合熱のモデリング..... 32
 東北大学金属材料研究所 余京智、川添良幸
 東北大学学際科学研究センター 徳田昌則

16. Predicting Structural Units in Crystals..... 37
Marcel H. F.Sluis, Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
17. 多値記録光磁気ディスクの記録過程のシミュレーション..... 39
東北大学金属材料研究所 石原正仁、水関博志、川添良幸、
日立マクセル(株)中央技術研究所 太田憲雄
18. 準結晶・アモルファス・液体金属の動的性質と電子状態..... 41
姫路工業大学理学部 石井靖
19. 超高压下での半導体構造..... 42
岩手大学人社学部 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
20. 酸化物高温超電導体の電流-電圧特性と不純物効果に対する数値
シミュレーション..... 43
東北大学金属材料研究所 小山富男
21. ペロフスカイト Mn 型酸化物における電子状態..... 45
東京大学工学部物理工学科 石原純夫
22. 遷移金属酸化物の光学的性質..... 47
東京大学工学部物理工学科 石原純夫
東北大学金属材料研究所 立木昌
ペンシルヴェニア大学 江上 毅
23. 炭材粒子の燃焼反応の計算機シミュレーション..... 49
東北大学金属材料研究所 川添良幸、余京智
東北大学学際科学研究センター 徳田昌則、石垣政裕、屈明昌
24. 強相関電子系の磁性と超伝導..... 50
東北大学金属材料研究所 松本秀樹
25. 電子ビーム励起による半導体の機能評価 —CL/EBIC 像の解析..... 53
東北大学金属材料研究所 関口隆史、渡辺貴郎

26. 3次元流動計算による酸化物融液の対流3次元構造…………… 54
九州大学機能物質科学研究所 柿本浩一
27. ペロフスカイト型 Co 酸化物の電子状態に対するクラスター計算…………… 55
名古屋大学工学部応用物理学科 筒井健二、井上順一郎
東北大学金属材料研究所 前川禎通
28. 厳密対角法による二次元 t-J 模型の励起スペクトルの研究…………… 56
三重大学教育学部 遠山貴巳
東北大学金属材料研究所 前川禎通
29. Mn 酸化物強磁性金属相における平均場理論…………… 57
名古屋大学工学部 岡本敏史、井上順一郎
名古屋大学理工科学総合研究センター 小椎八重航
東北大学金属材料研究所 前川禎通
30. フラストレートした系における一粒子励起スペクトル…………… 58
名古屋大学工学部 柴田康雅
三重大学教育学部 遠山貴巳
東北大学金属材料研究所 前川禎通
31. セレニウム・クラスターの第一原理的分子動力学シミュレーション…………… 59
金沢大学理学部 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
32. 高酸化数および低スピンマンガ化合物の Mn K α X 線発光スペクトル・ 61
(XES) と Mn 2p X 線光電子スペクトル (XPS) の関連性
東北大学金属材料研究所 奥 正興、松田秀幸、我妻和明
旭化成 小西徳三
33. 固相-液相転移の理論的研究…………… 62
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. トンネルコンダクタンスに対する乱れの効果…………… 64
名古屋大学工学部 熊崎隆男、柴田彰則、井上順一郎
東北大学金属材料研究所 前川禎通

35. $(\text{Sr}, \text{Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ の電子状態と励起スペクトル..... 65
名古屋大学工学部 水野義明
三重大学教育学部 遠山貴巳
東北大学金属材料研究所 前川禎通
36. マンガン酸化物におけるスピンと軌道の物理..... 66
名古屋大学理工科学総合研究センター 小椎八重航
名古屋大学工学部 河村有毅、岡本敏史、井上順一郎
東京大学工学研究科 石原純夫
東北大学金属材料研究所 前川禎通
37. 強相関電子系における不純物効果..... 68
東北大学金属材料研究所 小田島聡、松本秀樹
38. 固有ジョセフソン超伝導体における励起スペクトル..... 70
東北大学金属材料研究所 高橋三郎
39. 酸化物単結晶育成時の炉内輸送現象結晶内熱反応の数値..... 71
シミュレーション
東北大学金属材料研究所 福田承生、島村清史
東北大学反応化学研究所 宝沢光紀、塚田隆夫、柿木克之
40. Positron Annihilation Characteristics in Perfect Crystals and Vacancies of Semiconductors: First-Principles Calculations and Experiments..... 73
Z. Tang^{*1}, M. Hasegawa^{*1}, Z. Q. Li^{*1}, Y. Kawazoe^{*1}, S. Yamagichi^{*1},
T. Chiba^{*2}, T. Akahane^{*2}, M. Saito^{*3}, and H. Sumiya, ^{*4}
¹ Institute for Materials Research, Tohoku Univ.
² National Institute for Research in Inorganic Materials
³ NEC Informatec Systems
⁴ Itami Research Laboratories
41. 2次元ハバード模型の電子状態..... 75
ブラジリア大学 ICCMP 西川泰一郎
東北大学金属材料研究所 松本秀樹

42. 構造不規則系のエントロピーに関する計算機実験..... 76
防衛大学校数学物理学教室物理 荒井隆
東北大学金属材料研究所 相原智康
43. Numerical simulation for the growth of oxide dingle crystals by the
Czochralski technique..... 78
K.Boottcher, K.Shimamura, and T.Fukuda, Institute for Materials Research,
Tohoku Univ.

III. 論文リスト

[1]. 原著論文

1. Insertion of Be Atoms in C₆₀ Fullerene Cages: Be@C₆₀ 81
Phys. Rev. Lett. Vol.77 (1996) pp.3522-3524
Tsutomu Ohtsuki, Kazuyoshi Masumoto, Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama,
Yoshiyuki Kawazoe, Keisuke Sueki and Koichi Kikuchi
2. Magnetism of nanoscale fee-Fe clusters in Cu and Ag matrices 84
Materials Science & Engineering A217/218 (1996) pp.299-302
Zhi-Qiang Li, Yoshiyuki Kawazoe and Yuichi Hashi
3. Electronic structure of C₂₄₀ rings 88
Transactions of the Materials Research Society of Japan, Vol.20 (1996)
pp.486-489
Yuichi Hashi, Keivan Esfarjani, Satoshi Itoh, Shigeo Ihara, and
Yoshiyuki Kawazoe
4. Molecular dynamics simulation for binary amorphous Zr-Ni alloys 92
Journal of Non-Crystalline Solids, 205-207 (1996) pp.875-878
Tomoyasu Aihara Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
5. Ab-initio molecular dynamics study of the stability and reactivity of C₆₀ ... 96
Materials Science and Engineering, A 217/218 (1996) pp.19-22
Kaoru Ohno, Yutaka Maruyama and Yoshiyuki Kawazoe
6. Magnetoconductance fluctuations in a strongly correlated disordered ring
system at low temperatures 100
Phys. Rev. B, Vol.54, (1996) pp.17012-17017
Hao Chen, Masahito Ishihara, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
7. Magnetic Multi-Valued Recording by New Magnetic Configurations in
2D and 3D Artificial Lattices 106
IEEE Trans. Magn. Vol.32, (1996) pp.4335-4337
H. Mizuseki, M. Ishihara, X. Hu, Y. Kawazoe and N. Ohta

8. Molecular dynamics simulation for the cluster formation process of Lennard-Jones particles: Magic numbers and characteristic features..... 109
 J. Chem. Phys. 105 Vol.22, (1996) pp.5126-5137
 Tamio Ikesyoji, Bj ϕ rn Hafskjold, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe

9. Energy levels of D^0 and D^- in graded quantum-well structures of GaAs/Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As under magnetic fields..... 121
 Phys. Rev. B Vol.54 (1996) pp.16786-16791
 Jia-Lin Zhu, D.L.Lin and Y.Kawazoe

10. Magnetic Multi-Valued Magneto Optical Recording Using Magnetic Anisotropic Artificial Lattice..... 127
 J. Magn. Soc. Jpn Vol.20 (1996) pp.255-258
 H. Mizuseki, M. Ishihara, X. Hu, Y. Kawazoe and N. Ohta

11. Molecular Dynamics Simulation of Deformation and Fracture Metallic Materilas..... 131
 Modeling and Simulation for Materials Design, (1996) pp.191-196
 Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto

12. Large scale Monte Carlo Simulations of Center-adsorbed Star Polymers... 137
 The Journal of Chemical Physics, Vol.105 No.19 (1996) pp.8929-8936
 Kazuhito Shida, Kaoru Ohno, Masayuki Kimura and Yoshiyuki Kawazoe

13. Exact solution of two electrons in a quantum dot..... 145
 J. Phys. : Condens.Matter, 8 (1996) pp.7857-7862
 Jia-Lin Zhu, Jing-Zhi Yu, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe

14. Structural study of amorphous GdM $_2$ (M=Fe, Co, Ni) alloys by the amorphous X-ray scattering (AXM) method..... 151
 Journal of Non-Crystalline Solids, 205-207 (1996) pp.721-727
 M. Saito, Y. Waseda, E. Matsubara, X.-M. Wang, T. Aihara, K. Aoki and T. Masumoto

15. Electronic structures of C_{70} crystalline phases..... 158
 Chemical Physics Letters, 255 (1996) pp.367-372
 Kaoru Ohno, Jing-Zhi Yu, Yutaka Maruyama, Yoshiyuki Kawazoe and
 Takashi Takahashi

16. EBIC study on the electrical activity of stracking faults in silicon..... 164
 Materials Science and Engineering, B42 (1996) pp.235-239
 T. Sekiguchi, B. Shen, T. Watanabe, and K. Sumino

17. Cathodoluminescence and EBIC study on misfit dislocations in SiGe/Si
 heterostructure..... 169
 Materials Science and Engineering, B42 (1996) pp.141-145
 T. Sekiguchi, K. Sumino, Z. J. Raszimski, G. A. Rozgonyi

18. Short-range antiferromagnetic correlations in high- T_c oxide
 superconductors..... 174
 J. Phys. : Condens. Matter, 8 (1996) pp.4411-4428
 Marcello Allega, Hideki Matsumoto and Satoru Odashima

19. Magnetic properties of the two-demensional Hubbard model..... 192
 Physica C, 263 (1996) pp.70-73
 F. Mancini, S. Marra, H. Matsumoto

20. Effects of two-site local correlation in the 2D Hubbard model..... 196
 Physica C, 263 (1996) pp.66-69
 H. Matsumoto, S. Odashima, F. Mancini, S. Marra

21. Local magnetic moment in the two-demensional reduced p-d model..... 200
 Physics Letters A, 210 (1996) pp.429-432
 F. Mancini, S. Marra, D. Villani, H. Matsumoto

22. Analysis of the Two-demensional Negative-U Hubbard Model by
 Composite Operator Method..... 204
 International Journal of Modern Physics B, Vol.10 (1996) pp.2745-2756
 T. Di Matteo, F. Mancini, S. Marra and H. Matsumoto

23. Temperature dependence of electronic states in the t-J model..... 216
 Phys. Rev. B, Vol.54 (1996) pp.14445-14454
 Hideki Matsumoto, Taiichiro Saikawa and Ferdinando Mancini
24. Some Properties of the Positive-U and Negative-U Hubbard Model..... 226
 International Journal of Modern Physics B, Vol.10 (1996) pp.1717-1734
 F. Macini, M. Marinaro and H. Matsumoto
25. Two-site correlation in analysis of the Hubbard model..... 244
 Phys. Rev. B, Vol.55 (1996) pp.2095-2106
 Hideki Matsumoto and Ferdinando Mancini
26. Electronic polarizability in a correlated electron system with strong
 covalency..... 256
 Phys. Rev. B, Vol.53 (1996) pp.15563-15570
 S. Ishihara, M. Tachiki, and T. Egami
27. I - V characteristics of Josephson-coupled layered superconductors with
 longitudinal plasma excitations..... 264
 Phys. Rev. B, Vol.54 (1996) pp.16183-16191
 T. Koyama and M. Tachiki
28. Structural Stability of the Group-VIb Elements under High Pressure..... 273
 Phys. Stat. Sol. (b), 198 (1996) pp.475-480
 A. Nishawa, K. Niizeki, K. Shindo and K. Ohno
29. First-principle molecular dynamics calculation of selenium clusters..... 279
 Z. Phys. D, (1997) pp.1-4
 K. Uehara, M. Ishitobi, T. Oda and Y. Hiwatari
30. Theory of a generalized Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in heavy
 fermion and intermediate-valence superconductors..... 283
 Physica C, 263 (1996) pp.30-34
 S. Takahashi, M. Tachiki, R. Modler, P. Gegenwart, M. Lang and
 F. Steglich

31. Generalized Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in heavy-fermion and intermedeate-valence system 288
 Z. Phys. B, 100 (1996) pp.369-380
 M.Tachiki, S.Takahashi, P.Gegenwart, M.Weiden, M.Lang, C.Geibel, F. Steglich, R. Modler, C. Paulsen, Y. Onuki
32. Simple correlation between Mn-K α X-ray emission and Mn 2p X-ray photoelectron spectra for high oxidation number of low-spin manganese compounds 300
 J. Chem. Soc. Faraday Trans., 92 (1996) pp.2759-2764
 Masaoki Oku, Hideyuki Matsuta, Kazuaki Wagatsuma and Tokuzo Konishi
33. Density functional theory for the phase diagram of rigid C₆₀ molecules 306
 Phys. Rev. E, Vol.54 (1996) pp.3928-3932
 M. Hasegawa and K. Ohno
34. Correlated conductance through a lattice of quantum dots: Metal to antiferromagnetic insulator transition 311
 Phys. Rev. B, Vol.55 (1997) pp.1578-1581
 Hao Chen, Jian Wu, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe
35. Effects of quantum size and potential shape on the spectra of an electron and a donor in quantum dots 315
 Phys. Rev. B, Vol.55 (1997) pp.1673-1679
 Jia-Lin Zhu, Jian Wu, R.T.Fu, Hao Chen and Yoshiyuki Kawazoe
36. Annealing of Domain Pattern of Ferroelastic LaNbO₄ by Computer Simulation 322
 Ferroelectric, Vol.191 (1997) pp.51-57
 K. Parlinski, Y. Hashi, S. Tsunekawa and Y. Kawazoe
37. Ferroelastic Phase Transition in Pb₃(PO₄)₂ Studied by Computer Simulation 311
 J. Phys. I France, 7 (1997) pp.153-175
 K. Parlinski and Y. Kawazoe

38. Macroscopic magnetization tunneling and coherence in antiferromagnetic particles..... 352
 Physics Letters A, 226 (1997) pp.112-116
 Rong Luu, Jia-Lin Zhu, Xi Chen, Lee Chang and Yoshiyuki Kawazoe
39. First-principle molecular dynamics calculation of selenium clusters..... 357
 Molecular Simulation, Vol. 18 (1997) pp.385-394
 K. Uehara, M. Ishitobi, T. Oda and Y. Hiwatari
40. The Dependence of the Phase Diagram on the Range of the Attractive Intermolecular Forces..... 367
 J. Phys.: Condens. Matter, 9 (1997) pp.3361-3370
 Masayuki Hasegawa and Kaoru Ohno
41. Phonon-Associated Conductance through a Quantum Point Contact..... 377
 Phys. Rev. B, Vol.55, No.15 (1997) pp.9935-9940
 Hao Chen, Yaoming Shi, Jing Zhi Yu, Jia Lin Zhu and Yoshiyuki Kawazoe
42. Quantum Lattice Fluctuations in Nearly Degenerate Quasi One-Dimensional Polymers..... 383
 Synth. Met., 85 (1997) pp.1151-1152
 Chang Qin Wu and Yoshiyuki Kawazoe
43. Quantum Effect on the Phonon Excitations of the Su-Schrieffer-Heeger model..... 385
 Synth. Met., 85 (1997) pp.1165-1166
 Chang Qin Wu, Xin Sun and Yoshiyuki Kawazoe
44. Electron Interaction and Soliton Energy in Conjugated Polymer..... 387
 Synth. Met., 85 (1997) pp.1035-1036
 Xin Sun, Y. S. Ma, L. Li, Rong Tang Fu and Yoshiyuki Kawazoe
45. Magnetic Properties of Nanoscale Fe Clusters in Cu..... 389
 J. Magn. Magn. Mater., 167 (1997) pp.123-128
 Zhi Qiang Li, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe

46. Theoretical Study of Phase Stability in $\text{LaNi}_5\text{-LaCo}_5$ Alloys..... 395
 J. Alloys Compd., 248 (1997) pp.90-97
 Marcel Sluiter, Manabu Takahashi and Yoshiyuki Kawazoe
47. Hydrogen Site Occupation in YPd_3 with L1_2 Structure..... 403
 Phys. Rev. B, Vol.55, No.21 (1997) pp.14051-14054
 Sadae Yamaguchi, Zhi Qiang Li, Rong Tang Fu and Yoshiyuki Kawazoe
48. Stability and Reactivity of C_{60} Studied by All-Electron Mixed-Basis
 Molecular-Dynamics Simulation at Finite Temperatures..... 407
 Phys. Rev. B, Vol.53 (1996) pp.4078-4082
 K. Ohno, Y. Maruyama and Y. Kawazoe
49. Anisotropy in the Positron 2D Angular Correlation of Annihilation
 Radiation for Singly Negative Divacancies in Si..... 412
 Phys. Rev. Lett., Vol.78 (1996) pp.2236-2239
 Z. Tang, M. Hasegawa, T. Chiba, M. Saito, A. Kawasuso, Z. Q. Li,
 R. T. Fu, T. Akahane, Y. Kawazoe and S. Yamaguchi
50. Magnetic Multi-Valued Recording by New Magnetic Configurations in 2D
 and 3D Artificial Lattices..... 416
 INTERMAG'96, Seattle, WA, USA,
 IEEE Trans., Vol.32, No.5 (1996) pp.4335-4337
 H. Mizuseki, M. Ishihara, X. Hu, Y. Kawazoe and N. Ohta
51. Size and shape effects of quantum dots on two-electron..... 419
 Phys.Rev.B, Vol.55, No.23 (1997) pp.15819-15823
 Jia-Lin Zhu, Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu, Kaoyu Ohno and Yoshiyuki Kawazoe
52. Persistent currents in a one-dimensional disordered ring
 in the luttinger model..... 424
 Phy. Rev. B, Vol.55, No.24 (1997) pp.16300-16305
 Jia-lin Zhu, Xi.Chen and Yoshiyuki Kawazoe

53. Multimedia Database System Kind Featuring Amorphous Factual Database by Object-oriented Method..... 430
 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. Kojima, T. Nakanomyo, Y. Akiyama, T. Itoh, S. Wada and N. Mori
54. An ab initio approach to phonon spectrum of trans-polyacetylene..... 444
 J. Phys. Condens. Matter, 9 (1997) pp.L351-L354
 C. Q. Wu, R. T. Fu, Z. Q. Li and Y. Kawazoe
55. First-principles calculation of the structural and magnetic properties of Fe/Au and Cr/Au monatomic multilayers..... 448
 J. Phys. Condens. Matter, 9 (1997) pp.4549-4556
 Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li, Y. Kawazoe

[2]. 国際会議発表

1. The Construction and Application of KIND, A Materials Database..... 456
15th International CODATA Conference, (1996) pp.150-158
J. -Z. Yu, T. Nakanomyou, Y. Akiyama, T. Itoh, M. Ishihara, K. Takanashi,
S. Mitani, H. Fujimori, T. Kaneko and Y. Kawazoe
2. Molecular Dynamics Study of Zr_xNi_{100-x} ($x=0\sim 100$) Liquid and Rapidly
Quenched Amorphous Alloys..... 465
ICHMT Symposium on Molecular and Microscale Heat Transfer
in Materials Processing and Other Applications, Vol.1 (1996) pp.189-198
Tomoyasu Aihara, Jr., Tsuyoshi Masumoto and Yoshiyuki Kawazoe
3. 3-Dimensional Monte Carlo Simulation of Melting Transition of
Si Type Structures with aBCC Lattice Gas Model Including Many-Body
Interactions..... 475
Proceedings of the Second Topical Meeting on Structural Dynamics of
Epitaxy and Quantum Mechanical Approach
Kobe, Japan, (1997.1-22-23) pp.137-140
R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, S. Uda, T. Fukuda and Y. Kawazoe
4. Spin and orbital and their excitations in perovskite Mn oxides..... 479
Proceeding of the 21st International Conference on Low Temperature
Physics Prague, Czech (1996.8.8-14) pp.3225-3231
J. Inoue, S. Ishihara, W. Koshibae, Y. Kawamura, S. Okamoto and
S. Maekawa
5. Theory of Magnetism for Nanoscale Fe Clusters in Cu..... 486
The International Conference on Modelling and Simulation in Metallurgical
Engineering and Materials Science (1996) pp.19-23
Zhi-Qiang Li, Yuichi Hashi and Yoshiyuki Kawazoe
6. Numerical Simulation of Conductance through a Quantum Wire with Magnetic
Impurities in the Presence of Magnetic Fields..... 491
The International Conference on Modelling and Simulation in Metallurgical
Engineering and Materials Science (1996) pp.38-41
Hao Chen, Jian Wu, Zhi-Qiang Li and Yoshiyuki Kawazoe

7. Factual Database on Amorphous Alloys..... 495
 The International Conference on Modelling and Simulation in Metallurgical Engineering and Materials Science (1996) pp.801-806
 Jing-Zhi Yu, Yoshiyuki Kawazoe, Kaoru Ohno, Toshiyuki Itoh,
 Takashi Nakanomyo, Shigeo Wada, Youko Akiyama and Noriko Mori

8. A Monte Carlo Simulation of Si Crystal Growth on BCC Lattice with Energy Function of Coordination Numbers..... 501
 2nd International Workshop on Modelling in Crystal Growth
 Durby, Belgium, (1996) pp.201-203
 R. Sahara, H. Mizuseki, S. Uda, K. Ohno, T. Fukuda and Y. Kawazoe

9. Monte Carlo Simulation on Nucleation from Si Melt with Energy Function of Coordination Numbers and Bond Angles..... 504
 The 7th China-Japan Symposium on Science and Technology of Crystal and Materials, Shang-hai, China, (1996) pp.22-23
 S. Uda, R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, T. Fukuda and Y. Kawazoe

10. Spin and orbital excitations in perovskite Mn oxides..... 506
 Proceedings of the 21st International Conference on Low Temperature Physics Prague, Czech (1996.8.8-14) pp.1861-1862
 Jun-ichiro Inoue, Sumio Ishihara, Wataru Koshibae, and Sadamichi Maekawa

11. Electronic state in the 2D Hubbard model..... 508
 Proceedings of the 21st International Conference on Low Temperature Physics Prague, Czech (1996.8.8-14) pp.1869-1870
 Hideki Matsumoto and Ferdinando Mancini

12. Dynamical spin magnetic susceptibility in the 2D Hubbard model..... 510
 Proceedings of the 21st International Conference on Low Temperature Physics Prague, Czech (1996.8.8-14) pp.1871-1872.
 Ferdinando Mancini, Hideki Matsumoto, and Dario Villani

13. I – V characteristics of Josephson-coupled layered superconductors..... 512
 Proceedings of the 21st International Conference on Low Temperature Physics Prague, Czech (1996.8.8-14) pp.1011-1012.
 Tomio Koyama

[3]. 紀要等

1. 混合基底第一原理分子動力学法によるフラーレン系の動的挙動の研究..... 514
文部省科学研究費補助金重点領域研究(1)
「炭素クラスター」最終研究成果報告書(上)pp.243-250
川添良幸・大野かおる
2. サイエンティフィック・ビジュアライゼーション・システムの運用..... 522
東北大学金属材料研究所技術部・技術研究報告第17号 (1997) pp.19-24
佐藤和弘、中名生充、伊藤敏行、秋山庸子、大野かおる、水関博志、
川添良幸
3. アモルファス合金形成データブック作成プロジェクト..... 528
東北大学金属材料研究所技術部・技術研究報告第17号 (1997) pp.25-38
中名生充、伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、石原正仁、余京智、蔡安邦、
川添良幸
4. データベース構築用自動分類システムの開発..... 542
東北大学金属材料研究所技術部・技術研究報告第17号 (1997) pp.39-44
伊藤敏行、中名生充、秋山庸子、和田繁男、佐藤和弘、一関京子、
余京智、川添良幸
5. 金属材料研究所材料データベース KIND による研究動向調査 II 548
東北大学金属材料研究所技術部・技術研究報告第17号 (1997) pp.45-50
伊藤敏行、中名生充、和田繁男、余京智、川添良幸
6. Non-isothermal nucleation in strongly supercooled liquids..... 554
Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.13-15
K. Ohno, H. Trinkaus, and H. Muller-Krumbhaar
7. Renormalization of Interatomic Potentials and Lattice Gas Models..... 557
Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.17-21
Kaoru Ohno

8. A Monte Carlo Simulation Describing Melting Transition of Si-Type Structure in the Condensed Phase with BCC Lattice Model Including Many-Body Interactions..... 562
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.23-28
 R. Sahara, H. Mizuseki, K. Ohno, S. Uda, T. Fukuda, and Y. Kawazoe

9. Intermolecular Potentials and Phase Diagrams..... 568
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.29-33
 Masayuki Hasegawa and Kaoru Ohno

10. Nucleation Processes in Incommensurate Phases..... 573
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.51-53
 K. Parlinski

11. A New Model for Crystal Growth under High Magnetic Field..... 576
 -Effect of Environment in Diffusion-Limited Aggregation-
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.55-59
 H. Mizuseki, K. Tanaka, K. Ohno and Y. Kawazoe

12. A Mechanism of 13% Lattice Expansion in C₆₀ FCC(110) Thin Films Grown on the GaAs(001) As-rich Surface..... 581
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.61-65
 K. Ohno, Z. Q. Li, H. Kamiyama, Y. Kawazoe, Q. Xue, T. Hasegawa, H. Shinohara and T. Sakurai

13. Etchat and Probabilistic Ballistic Models of Diamond Thin Film Growth... 586
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.67-75
 K. Ohno, M. Itoh, R. Sahara, M. Takahash, X. Hu, and Y. Kawazoe

14. A CCA Model for Gelation Process in Silica System..... 595
 Sci. Rep. RITU A43, No.1 (1997) pp.77-82
 K. Ohno, X. Hu, and Y. Kawazoe

15. Surface Reconstruction of Si(001) by Genetic Algorithm and Simulated Annealing Method..... 601
Sci. Rep. RITU A44, No.1 (1997) pp.77-81
Rong Tang Fu, Keivan Esfarjani, Yuichi Hashi, Jian Wu, Xun Sun and Yoshiyuki Kawazoe
16. 超大規模シミュレーション計算における並列計算機の可能性..... 606
Hitac ユーザ研究会 (1997) pp.145-152
川添良幸、水関博志、秋山庸子、一関京子

IV. 予稿集リスト

[1]. 1996 年

1. バナジウム結晶中の転位と格子間原子の相互作用に関する
シミュレーション..... 615
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.98
神山博、小杉武史、川添良幸、松井秀樹
2. 半導体完全結晶および原子空孔の陽電子消滅2次元角相関..... 615
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.105
長谷川雅幸、唐政、千葉利信、斉藤峯雄、河裾厚男、末澤正志、李志強、
川添良幸、山口貞衛
3. Si結晶成長を再現する多体力を考慮したモンテカルロシミュレー
ション(II) 615
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.483
佐原亮二、水関博志、宇田 聡、大野かおる、福田承生、川添良幸
4. 結晶成長における外乱の効果..... 616
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.484
水関博志、菊池圭子、田中一美、大野かおる、川添良幸
5. 重力の影響を考慮した凝固過程のシミュレーション..... 626
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.485
水関博志、田中一美、菊池圭子、一関京子、大野かおる、川添良幸
6. アモルファスならびに結晶合金の原子レベル応力に関する
分子動力的研究..... 616
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.691
相原智康、増本健、川添良幸
7. Spectra of neutral and negative donors in quantum-well structures with
strong magnetic fields..... 617
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.707
Jia-Lin Zhu

8. Adsorption of C_{60} on GaAs(001) surface: An ab-initio study..... 617
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.708
Zhi-Qiang LI, Rong-Tang Fu, Yoshiyuki KAWAZOE
9. Molecular-dynamics simulation of excitation in conducting polymer..... 617
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.779
Rong-Tang Fu, Jia-Lin Zhi, Jing-Zhi Yu, Kaoru Ohno, and
Yoshiyuki Kawazoe
10. Harmonic and Anharmonic Vibrational investigations in C_{70} 618
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.846
Jing-Zhi Yu, Rong-Tang Fu, Jian Wu and Yoshiyuki Kawazoe
11. Cluster Structure Optimization with Genetic Algorithm..... 618
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.849
Jian Wu, Zhi-Qiang Li, Jing-Zhi Yu, Yoshiyuki Kawazoe and Bing-Lin Gu
12. 磁性多層膜光磁気記録媒体への多値記録過程のシミュレーション..... 618
日本金属学会秋期大会講演概要 (1996) No.1084
石原正仁、水関博志、川添良幸、島崎勝輔、太田憲雄
13. Stability of C_{240} fullerene ring in cluster form and crystalline phase..... 619
8th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters
(1996) p.8.6
K.Esfarfani, Y.Hashi, K.Ohno, S.Itoh, S.Ihara and Y.Kawazoe
14. Magnetic Multi-Valued Magneto Optical Recording Using Magnetic
Anisotropic Artificial Lattices..... 620
Magneto Optical Recording International Symposium '96,
Noordwijkerhout, The Netherlands, (1996) p.WP.10
Hiroshi Mizuseki, Masahito Ishihara, Xiao Hu, Yoshiyuki Kawazoe, and
Norio Ohta
15. 金属材料研究所データベースKINDによる研究動向調査(II)..... 621
平成8年度電気関係学会東北支部連合大会 講演論文集 (1996) p.38
伊藤敏行、和田繁男、中名生充、余京智、川添良幸

16. SEM画像のコンピューター処理によるオパール表面の自動解析..... 622
平成8年度電気関係学会東北支部連合大会 講演論文集 (1996) p.59
菊池圭子、田中一美、恒川信、水関博志、川添良幸
17. 半経験的タイトバインディング法による遷移金属クラスターの..... 623
電子状態計算
東北大学金属材料研究所 第93回秋期講演会 (1996) p.23
種田晃人、Keivan Esfarfani、橋祐一、川添良幸
18. The Structures, Energetics and Electronic Properties of Small Urea
Clusters from ab Initio Calculations..... 624
東北大学金属材料研究所 第93回秋期講演会 (1996) p.22
R.V.Belosludov, Zhi-Qiang Li, Yoshiyuki Kawazoe
19. Beyond the Born-Oppenheimer Approximation; Application to Three
Fermion Systems..... 625
東北大学金属材料研究所 第93回秋期講演会 (1996) p.21
A.A. Farajian, K. Esfarjani and Y. Kawazoe
20. Thermodynamic Calculation of the Ni-Al-Co Ternary System..... 626
CALPHAD XXIV, Kyoto, Japan, (1995) p.3.5
H. Ohtani, M. Shinoda, J.-Z. Yu, M. Sluiter, K. Esfarjani, Y. Kawazoe and
K.Ishida
21. First Principle studies of site preference in FeCr and FeV sigma
phase alloys..... 627
CALPHAD XXV, Erice, Italy, (1996) p.5.5
M. Sluiter, K. Esfarjani, Y. Kawazoe
22. Phase Stability under High Pressure in Al-Ag Alloys..... 628
CALPHAD XXV, Erice, Italy, (1996) p.16.2
Jing-Zhi Yu, Marcel Sluiter and Yoshiyuki Kawazoe
23. Unique Magnetic Properties of Microclusters and Their Application to Realize
Multi-Values Magnetic Recording Media..... 629
Internaitonal Conference on Advanced Materials and Deviced '96 (1996) p.114
Yoshiyuki Kawazoe

24. Molecular Dynamics Simulation of Deformation and Fracture in Metallic Materials..... 630
 CMSMD'96 (1996) p.3-1
 Tomoyasu Aihara, Jr., Yoshiyuki Kawazoe and Tsuyoshi Masumoto
25. 新材料特性的超級計算機模擬予測..... 631
 MRS 中国材料研究会 (1996) p.1
 川添良幸
26. 量子点的電子-離子和電子-電子相互作用研究..... 632
 MRS 中国材料研究会 (1996) p.5
 朱嘉麟、顧秉林、川添良幸
27. 一次元有機材料中の量子晶格揺動..... 633
 MRS 中国材料研究会 (1996) p.31
 吳長勤、曾上游、王健、川添良幸
28. 星型ポリマーの第二ビリアル係数と流体力学的半径のシミュレーション... 634
 平成7年度科学研究費総合研A研究会要旨集 (1996) pp.117-119
 志田和人、大野かおる、木村正行、川添良幸
29. Effects of Strong Randomness on S-wave and D-wave Superconductors... 637
 9th International Symposium on Superconductivity (1996) p.39, No.PYP-1
 T. Koyama and S. Odashima
30. AC Josephson Effects in Intrinsic Layered Superconductors..... 637
 9th International Symposium on Superconductivity (1996) p.39, No.PYP-2
 T. Koyama
31. 厳密対角化法によるマンガン酸化物の磁性の研究..... 638
 日本物理学会講演概要集1996年秋の分科会 p.436, No.2a-S-7
 小椎八重航、河村有毅、岡本敏史、井上順一郎、前川禎通、石原純夫
32. 厳密対角化法によるマンガン酸化物のスピン・軌道・電荷秩序の研究... 639
 日本物理学会講演概要集1996年秋の分科会 p.527, No.3p-PSB-10
 小椎八重航、河村有毅、岡本敏史、井上順一郎、前川禎通、石原純夫

33. 強相関電子系における磁性不純物の磁氣的性質…………… 640
 日本物理学会講演概要集1996年秋の分科会 p.526, No.3p-PSB-7
 水野義明、柚木清司、前川禎通
34. 2次元ハバードモデルの電子状態における不純物効果…………… 640
 日本物理学会講演概要集1996年秋の分科会 p.526, No.3p-PSB-8
 小田島聡、松本秀樹
35. 電気電動に対する界面の乱れの効果…………… 641
 日本物理学会講演概要集1996年秋の分科会 p.71, No.2a-YH-8
 伊藤博介、井上順一郎、前川禎通
36. 東北大学金属材料研究所材料データベース/KIND…………… 642
 –アモルファスデータベースの現状–
 川添良幸、余京智、石原正仁、中名生充、秋山庸子、伊藤敏行、
 和田繁男、一関京子、佐藤和弘
37. 歯肉炎症状態の画像解析…………… 652
 平成8年度電気関係学会東北支部連合大会 講演論文集 (1996) p.58
 田中一美、菊池圭子、石原正仁、川添良幸
38. コンピューター通信を利用した日本学習の展開…………… 653
 平成8年度日本語教育学会秋期大会予稿集 (1996) p.49-54
 才田いずみ、リチャード・ハリソン、デイビッド・インマン、大坪一夫、
 松崎寛、川添良幸、井口寧

[2]. 1997 年

1. First-Principle Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO_2 …………… 659
 日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.232
 K. Parlinski, Z. - Q. Li, Y. Kawazoe
2. Ab Initio Force Constants and the Prediction of Elastic Constants in
 Low-symmetry Crystals…………… 659
 日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.247
 Marcel Sluiter

3. Ab initio investigation on the nondegenerate ground state of
cis-polyacetylene..... 659
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.248
C. Q. Wu, J. Z. Yu and Y. Kawazoe

4. 第一原理計算による Fe/Au, Cr/Au 単原子積層多層膜の持つ特異な
磁性の研究..... 660
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.249
王建涛、李志強、川添良幸

5. タイトバインディング法による銅クラスターの電子状態..... 660
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.305
種田晃人、Keivan Esfarjani、李志強、川添良幸

6. Ni/Ni₃Al 整合界面における原子レベル応力に関する
分子動力的研究.....660
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.538
正朋祥、相原智康、川添良幸

7. 液体急冷法によるアモルファス相形成し易い三元系合金の混合
エンタルピーのモデリング..... 661
日本金属学会春期大会講演概要 (1997) No.868
余京智、徳田昌則、川添良幸

8. Prediction of Materials Properties by a Large Scale Computer Simulation
Based on the First Principles Calculations -Beyond Present Level-..... 662
Proceeding of the Symposium '97 on Theoretical Solid State Physics
Yoshiyuki Kawazoe

9. Numerical Simulations for Superconductors with Strong Randomness..... 663
5th International Conference Materials & Mechanisms of Superconductivity
High-Temperature Superconductors (1997) p.281. No.MO-PS-285
T. Koyama and S. Odashima

10. Electronic States in the t-J Model..... 663
5th International Conference Materials & Mechanisms of Superconductivity
High-Temperature Superconductors (1997) p.272. No.MO-PS-237
Hideki Matusmoto, Taichiro Saikawa and Ferdinando Mancini
11. Mn 酸化物における光学電気伝導度..... 664
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.644, No.31a-G-4
石原純夫、永長直人
12. 厳密対角化法を用いたマンガン酸化物における励起スペクトルの計算・・ 664
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.644, No.31a-G-5
前川禎通、小椎八重航、井上順一郎
13. 厳密対角化法によるマンガン酸化物の磁化過程..... 664
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.644, No.31a-G-6
小椎八重航、河村有毅、井上順一郎、前川禎通
14. フラストレートした系における一粒子励起スペクトル..... 665
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.574, No.28p-J-11
柴田康雅、遠山貴己、前川禎通
15. $(\text{Sr}, \text{Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ の電子状態と励起スペクトル II 666
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) No.31a-J-9
水野義明、遠山貴己、前川禎通
16. スピン・電荷・軌道の分離と結合..... 667
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.643, No.30p-WB-8
前川禎通
17. Mn 酸化物強磁性金属相における平均場理論..... 667
日本物理学会講演概要集第52回 (1997) p.643, No.31a-G-2
岡本敏史、小椎八重航、井上順一郎、前川禎通

18. Josephson Plasma Excitation in High-Tc Superconductors with Finite Dimensions..... 668
1997 Internaitonal Symposium on Intrinsic Josephson Effect and THz Plasma Oscillations in High Tc Superconductors (1997) No.2-LN
S. Takahashi, M. Tachiki and K. Kadowaki
19. First Principle Calculation of the Structural and the Magnetic Properties of Fe/Au and Cr/Au Monatomic Multilayers..... 669
東北大学金属材料研究所第94回春季講演会 (1997. 5. 22)
Jian-Tao Wang, Zhi-Qiang Li, and Yoshiyuki Kawazoe
20. Effects of Cluster-Cluster Interaction on the Structure and Magnetic Properties in $(Fe_6)_2$ 670
東北大学金属材料研究所第94回春季講演会 (1997. 5. 22)
Q. Sun, J. Z. Yu, Z. Q. Li, J. T. Wang and Y. Kawazoe
21. データベースによる材料設計支援..... 671
東北大学金属材料研究所第94回春季講演会 (1997. 5. 22)
中名生充、伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、余京智、佐藤和弘、石原正仁、川添良幸
22. 液体急冷法によるアモルファス相の形成し易い三元系合金の混合のモデリング..... 672
東北大学金属材料研究所第94回春季講演会 (1997. 5. 22)
余京智、川添良幸、中名生充、伊藤敏行、和田繁男、秋山庸子、佐藤和弘、徳田昌則
23. 超大規模シミュレーション計算の並列化による高速化..... 673
東北大学金属材料研究所第94回春季講演会 (1997. 5. 22)
水関博志、一関京子、秋山庸子、大野かおる、川添良幸
24. C_{60} 分子の半導体表面への吸着過程の分子動力学シミュレーション..... 674
東北大学金属材料研究所 研究部共同研究報告書 平成8年度 p.200
神山博、大野かおる、櫻井利夫、Que Qikun、李志強、川添良幸

25. シリコンクラスターの安定構造と IR スペクトル..... 676
超微粒子とクラスター懇談会 第一回研究会、東京 (1997.4)
川添良幸、Keivan Esfarjani、橋祐一
26. Arレーザ照射された C_{60} のSTM像と部分電荷密度: C_{58} の可能性..... 680
超微粒子とクラスター懇談会 第一回研究会、東京(1997.4)
大野かおる、胡長武、粕谷厚生、川添良幸、丸山豊
27. Zr-Ni アモルファスならびに過冷却液体合金の高歪速度条件下における
粘性挙動の分子動力学シミュレーション..... 682
第10回 計算力学講演会、東京(1997.7)
相原智康、増本健、川添良幸
28. 全電子全ポテンシャル第一原理分子動力学法と
その新物質設計への応用..... 684
第10回 計算力学講演会、東京(1997.7)
川添良幸
29. Micromagnetic study of ultrathin magnetic films..... 686
International conference on advanced materials'97
European materials research society spring meeting
Strasbourg, France (1997.6)
X. Hu and Y. Kawazoe
30. Hydrodynamic simulations of space experiments..... 686
International conference on advanced materials'97
European materials research society spring meeting
Strasbourg, France (1997.6)
H. Mizuseki, Z. Zeng, K. Ichinoseki, Y. Kawazoe and K. Higashino
31. A new model of DLA under high magnetic field..... 686
International conference on advanced materials'97
European materials research society spring meeting
Strasbourg, France (1997.6)
H. Mizuseki and Y. Kawazoe

32. Application of computational physical techniques to the design of new
"Artificially-intelligent" nanoscale devices..... 687
Australasia-pacific forum on intelligent processing and
manufacturing of materials
Goldcoast, Australia (1997.7)
K. Esfarjani and Y. Kawazoe
33. Can materials properties be predicted before experiments?
Large scale computer simulations by a first principles approach..... 688
Australasia-pacific forum on intelligent processing and
manufacturing of materials
Goldcoast, Australia (1997.7)
Y. Kawazoe
34. First Principle Calculation of the Structural and the Magnetic
Properties of Fe/Au and Cr/Au Multilayers..... 689
15th international colloquium on Magnetic Films & Surfaces
Sunshine Coast, Australia (1997.8)
Zhi-Qiang Li, Jian-Tao Wang and Y. Kawazoe
35. 大規模モンテカルロシミュレーションにおけるベクトル型スーパー
コンピューターの適用限界と並列計算機の活用例..... 691
第16回DECUSシンポジウム DECUS-NEWS'97
水関博志、川添良幸
36. Theoretical study of structures,energetics,and electroic properties
of small urea clusters by ab initio calculations..... 700
Journal of inorganic biochemistry Vol.67, No.1-4 (1997) pp.453.
R. V. Belosludov, Zhi-Qiang Li, Yoshiyuki Kawazoe
37. 核生成理論とシミュレーション..... 701
平成8年度東北大学金属材料研究所研究部共同研究報告 (1997.5)
大野かおる

V. 研究会等

1. 『コンピューターシミュレーションによる物質科学
-分子動力学とモンテカルロ法-』
先端科学技術・情報教育センター (1997)
講師 川添良幸 大野かおる
2. 『コンピューターシミュレーションによる原子・電子レベルでの材料
創成研究会』
日本金属学会研究グループ (1997)
発起人・世話人 川添良幸

VI. 新聞記事

1. 『東北大金属材料研究所川添教授ら、3次元対流現象、スパコンで解明』
河北新報1996年9月27日(金)..... 705
2. 『東北大金属材料研究所川添教授ら、半導体原料結晶体の不良材料発生
原因を解明』
朝日新聞1996年10月3日(木)..... 706

VII. 雑誌掲載解説記事

1. 『多部門多目的データバンク構築のための基礎的研究』..... 707
ネットワーク代表者 金属材料研究所 川添良幸
東北大学学報 第1425号別冊 (1996) p.10-11
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』..... 709
まてりあ 第35巻 第8号 (1996) pp.906-911
大野かおる
3. 『並列計算機は実際に超大規模計算に役立つのか?』..... 715
bit 4月号 Vol.29 No.4 (1997) pp.85-93
川添良幸、水関博志、八重樫育生

4. 『巨大磁気伝導の新展開:総論』…………… 724
固体物理 4月号 Vol.32 No.374 (1997) pp.205-211
前川禎通
5. 『マンガン酸化物の磁気構造 -電荷・スピン・軌道結合-』…………… 731
固体物理 4月号 Vol.32 No.374 (1997) pp.317-325
井上順一郎、小椎八重航
6. 『Mn 酸化物における軌道液体』…………… 740
固体物理 4月号 Vol.32 No.374 (1997) pp.339-346
永長直人、石原純夫
7. 『一次元モット絶縁体でのスピン・電荷分解』…………… 748
固体物理 5月号 Vol.32 No.375 (1997) pp.361-368
遠山貴己、前川禎通
8. 『大規模モンテカルロ・シミュレーションにおけるベクトル型…………… 756
スーパーコンピュータの適応限界と並列計算機の活用例』
DECUS NEWS '97 (1997) p.6
水関博志
9. 『コンピューターシミュレーションによる材料の設計』…………… 757
JSV日本シルバーボランティアズ会報 (1997) p.13
川添良幸
10. 東北大学付置研究所 -金属材料研究所- …………… 758
東北大学案内 (1996) p.72
11. My stay at IMR -外から見た金研- …………… 759
IMR ニュース (1996) pp.13-15
Hao Chen
12. 材料設計研究部助教授就任の挨拶…………… 762
第2回新素材設計開発施設ニュース (1997) pp.2-3
Marcel H. F. Sluiter
13. 第Ⅲ種客員教授就任の挨拶…………… 763
第2回新素材設計開発施設ニュース (1997) pp.4-5
K. Parlinski

VIII. 出版

1. 『コンピューターシミュレーションによる物質科学
-分子動力学とモンテカルロ法-』
共立出版 (1996)
川添 良幸、大野 かおる、三上 益弘
2. 『C プログラミング』
共立出版 (1997)
川添良幸、青山智夫
3. 『Phase Diagrams and Physical Properties of Nonequilibrium Alloys,
Subvolume A
Nonequilibrium Phase Diagrams of Ternary Amorphous Alloys 』
Landolt-Boernstein series III/37
Y. Kawazoe, T. Masumoto, K. Suzuki, A. Inoue, A. -P. Tsai, J. -Z. Yu,
T. Aihara Jr. and T. Nakanomyo, Springer-Verlag (1997)
4. 『自然科学とコンピュータ』
共立出版 (1997)
川添良幸、神山 博

IX. その他

1. 本所情報関係委員会メンバー・学内情報関連委員…………… 765
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…………… 766
3. 東北大学金属材料研究所構内図…………… 767
4. スーパーコンピューター棟レイアウト図…………… 768