

Cu-3d orbitals. The excess holes polarize the spin system through this effect, thereby interacting among themselves through this polarization. Binding energy between two holes is calculated from the ground state energy of some finite size systems. The interaction is attractive in some parameter region where 2 holes make a singlet pair.

11. 遷移金属と軽い原子との合金の電子状態と磁性

山崎 亨

新しい永久磁石の素材である $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ において、ホウ素は強磁性を安定化するのにある役割を果たしていると考えられるが、完全に解明されているとはいえない。そして、B, C, Nなどの軽い元素が鉄の強磁性に及ぼす影響も、いまのところでは、1ケの不純物原子の場合にのみ報告されている。そこで、それらの原子を有限濃度含んだ置換型合金を考え、KKR-CPA-LSDにより電子構造を第一原理から計算し、それらの元素の合金効果を調べた。

12. A Temperature Shift Method in Canonical Molecular Dynamics

大塚博巳

We propose a method for obtaining the average values of physical quantities at temperatures different from the assumed value from a simulation calculation of the constant temperature molecular dynamics (MD) with a fixed temperature. The method is developed on the basis of Nosé's canonical MD. The present method is numerically tested in a simulation on a 13-atom Lennard-Jones cluster.