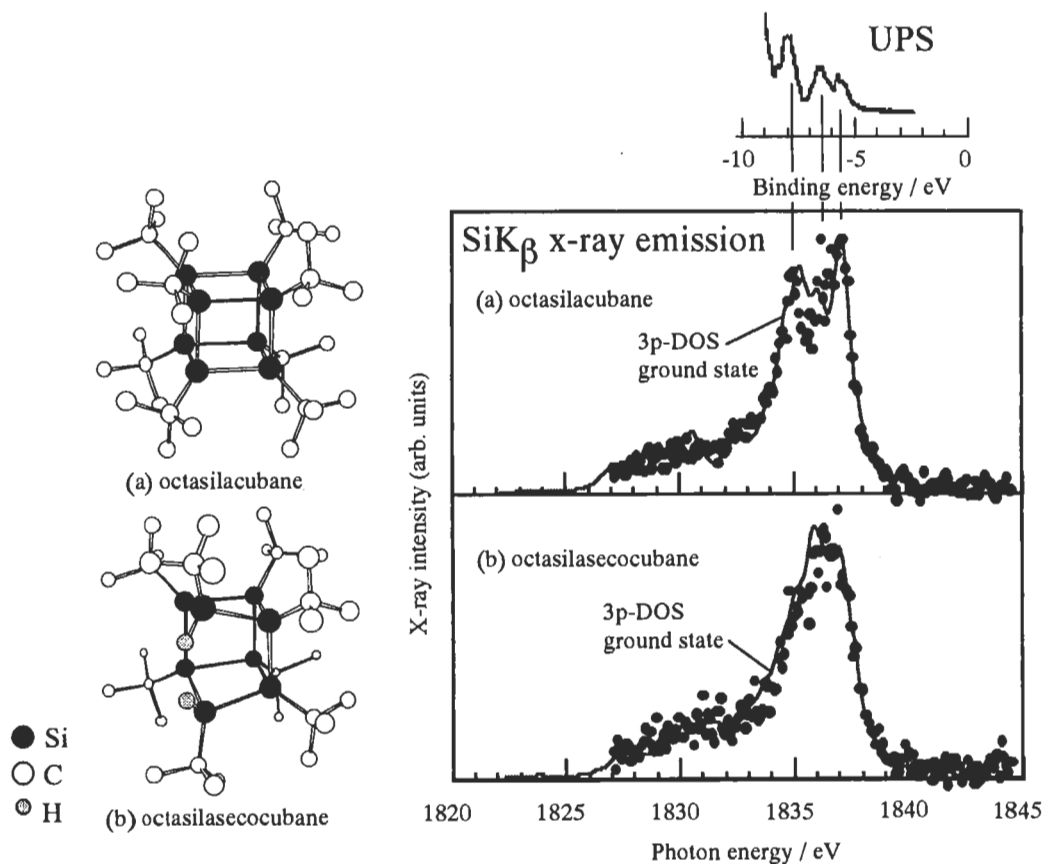


# DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational  $X\alpha$   
Vol. 13, No. 1 (2000)



## SiK $\beta$ x-ray emission and calculated Si3p-DOS spectra of cubic silicon clusters

# DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational  $X\alpha$   
Vol. 13, No. 1 (2000)

## 目次

第6回 DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞 姫井祐助氏 村松康司氏 横溝臣智氏	2
第13回 DV- $X\alpha$ 研究会報告書	
・ ・ ・ はじめに	11
・ ・ ・ 集合写真	12
・ ・ ・ 参加者名簿	13
・ ・ ・ スナップ写真集	16
・ ・ ・ プログラム	18
・ ・ ・ 講演番号 Index	22
・ ・ ・ 研究会報告書 A1~B16	23
(B17以後は No.2 に掲載予定です)	
第14回 DV- $X\alpha$ 研究会 (国際シンポジウム) のお知らせ/編集後記	152
第7回 「DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞」受賞候補者の募集	153

編集 DV- $X\alpha$  研究協会

# 第13回DV-X $\alpha$ 研究会プログラム

会期：2000年 8月2日(水)～4日(金)

会場：京都大学工学部物理系校舎 315号室 (講演会場)  
214・215号室 (ポスター会場)

〒606-8501 京都市左京区吉田本町

敬称略

登壇者のみ記載(共同研究者は当日の発表または報告書をご覧ください。)

講演時間：特別講演 60分(講演50分+質疑応答10分)

招待講演 30分(講演25分+質疑応答5分)

一般講演 7分(講演5分+質疑応答2分)

<8月2日(水)>

(13:00~13:10) 開会の辞 (足立 裕彦)

(13:10~13:52) 材料科学(I)

<座長：石井 知彦>

A1 小和田 善之(兵庫大)

Ag I系超伝導体中のAgイオンの移動と化学結合の変化

A2 吉野 正人(名大工)

プロトン伝導性ペロブスカイト型酸化物BaZrO<sub>3</sub>の電子状態

A3 劉 軼(名大工)

カーボンナノチューブへのLi吸蔵機構

A4 茂木 昌都(日産7-ク)

LiCoO<sub>2</sub>における格子欠陥のDV-X $\alpha$ 分子軌道法による検討

A5 高橋 靖彦(物工研)

LiCoO<sub>2</sub>の電子密度分布解析

A6 久世 智(東工大)

放射光によるMnS<sub>2</sub>の電子密度分布の実測とDV-X $\alpha$ 法による検証

(13:52~14:00) 休憩

(14:00~14:56) 材料科学(II)

<座長：関根 理香>

A7 刀原 寛孝(湘南工大)

DV-X $\alpha$ 法による珪化鉄熱電半導体のゼーベック係数へのアプローチ

A8 申 ウソク(名工研)

NaCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>の電子状態

A9 中津川 博(横国大工)

Bi<sub>2-x</sub>Pb<sub>x</sub>Sr<sub>3-y</sub>Y<sub>y</sub>Co<sub>2</sub>O<sub>9</sub>及びSrPbO<sub>3</sub>の電子構造

A10 内田 陽子(日立)

酸化タンタルの電子状態の基礎検討

A11 高原 渉(阪大工)

レーザー照射による遷移金属窒化物形成に関する電子論的基礎検討

A12 萩原 達也(岡大自然)

7ルカリウムを2成分ガラスの電子状態

A13 湯川 宏(名大工)

BCC重金属タンタルおよびタンガステン中の合金元素の電子状態

A14 杉原 淳(湘南工大)

界面の電子構造から見た電子セラミックスの電極金属による濡れ性

(14:56~15:05) 休憩

(15:05~16:05) 特別講演

<座長：足立 裕彦>

A15 向山 毅(京大名誉教授)

DV-X $\alpha$ な私

- (16:05~17:00) ポスターセッション  
 (17:00~) 運営委員会  
 (18:30~) 懇親会 (京大会館)

<8月3日 (木)>

(9:00~9:10) 事務連絡

- (9:10~9:45) 計算法 <座長 : 水野 正隆>  
 B1 中川 克己 (キャン) Fock 行列を用いた分配エネルギーの性質  
 B2 小笠原 一禎 (京大工) 相対論 DV-ME 法の開発  
 B3 福島 公親 (東芝) 反強磁性の第一原理計算  
 B4 牧野 至洋 (京大工) Ewald 法を導入した DV-X $\alpha$ 法によるシリカガラスの電子状態  
 B5 中松 博英 (京大化研) KLI-SIC-X $\alpha$ の導入 ~密度汎関数の実用的で本質的な  
 進歩はこれか~

(9:45~9:55) 休憩

- (9:55~10:51) 表面・界面・欠陥 <座長 : 湯川 宏>  
 B6 田中 久美子 (静大理) 酸化物表面の電子状態 ~最適なモデルを探れ~  
 B7 永田 徳久 (富士電機) ZnO 表面の吸着酸素の電子状態  
 B8 大場 史康 (京大工) ZnO 対称傾角粒界の電子状態  
 B9 大串 貞一郎 (京大工) 環境依存型 EAM ポテンシャルによるアルミニウムの粒界エネルギーの計算  
 B10 生駒 俊之 (無機材研) 有機官能基と水酸がタイト界面の電子状態  
 B11 福田 剛巳 (岡大自然) BCC 刃状転位モデルの結合状態  
 B12 中野 雅信 (京大工) In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 中の点欠陥の局在量子構造  
 B13 森分 博紀 (京大工) スピネル型結晶構造酸化物 MgCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 中の陽イオン空孔の第一原理計算

(10:51~11:00) 休憩

- (11:00~11:49) 有機物・錯体 <座長 : 小和田 義之>  
 B14 石井 知彦 (都立大理) 金属ポルフィリンを含む C<sub>60</sub> 化合物の電子状態  
 B15 大下 祥雄 (豊田工大) C<sub>60</sub> 薄膜への不純物ドープング  
 B16 尾上 順 (理研) C<sub>60</sub> 三重項励起状態の基準振動解析  
 B17 白水 香織 (福岡大理) DV-X $\alpha$ 法を用いたアルミニウムキレート錯体の電子状態解析  
 B18 山口 敏弘 (龍谷大理工) DV-X $\alpha$ 分子軌道計算によるコバルト錯体の電子状態の解析  
 B19 横溝 臣智 (福岡大理) Si 複核錯体の DV-X $\alpha$ 法による XANES 構造解析  
 B20 山重 寿夫 (福岡大理) DV-X $\alpha$ 法を用いたマツウギのヘモグロビンの鉄近傍電子状態解析

(11:49~12:00) 写真撮影

(12:00~12:50) 昼食

(12:50~13:46) 分光 (I)

B21 溝口 照康 (京大工)

B22 松尾 修司 (福岡大理)

B23 巽 一徹 (京大工)

B24 山下 大輔 (早大理工)

B25 辻 淳一 (大阪電通大)

B26 李 江 (京大工)

B27 藤田 昌樹 (静大理工)

B28 岩田 貴普 (京大工)

<座長 : 中松 博英>

ELNES を用いた MgO 中 Si 近傍の局所状態解析

XANES スペクトルと DV-X $\alpha$  分子軌道計算による鉄さびの状態分析

3d 遷移金属化合物における ELNES のスペクトル形状の系統的变化

XANES spectra of Sesqui-oxides of Al, Cr and Fe

種々のリチウム化合物における Li K-edge スペクトル

MgO-ZnO 固溶体からの ELNES とその理論計算

ペロブスカイト型酸化物の XANES へビークの起源は何か~

TiO<sub>2</sub> (ルチル), SrTiO<sub>3</sub> の Ti-L<sub>2,3</sub> 励起端 ELNES の第一原理計算

(13:46~14:00) 休憩

(14:00~16:00) 特別企画

「DV-X $\alpha$ 法の将来についてのディスカッション——Pt2」

副題・・・研究手段として見たときのDV-X $\alpha$ 法の可能性と限界

招待講演

B29 藤間 信久 (静大工)

<座長 : 尾上 順>

DV 法による non-collinear 電子状態の計算: 遷移金属

クラスターの磁気モーメント

招待講演

B30 水野 正隆 (阪大工)

<座長 : 尾上 順>

DV-X $\alpha$ 法による陽電子寿命の第一原理計算

(16:00~17:00) ポスターセッション

(17:00~)

幹事会

(18:30~)

役員合同会議

<8月4日 (金)>

(9:00~9:10) 事務連絡

(9:10~9:45) 分光 (II)

C1 上野 祐子 (NTT)

C2 高橋 昌男 (阪大産研)

<座長 : 尾上 順>

活性炭表面酸化物の軟X線スペクトルとDV-X $\alpha$ 計算による構造解析

密度汎関数法によるシリコン窒化物のXPS

- C3 村松 康司 (原研関西研) DV-X $\alpha$ 分子軌道計算によるキュービックシリコンのSi K, Si L X線発光スペクトルの解釈
- C4 森居 隆史 (岡大自然) 遷移金属サイトの軟X線発光スペクトルのDV-X $\alpha$ 法による解析 (2)
- C5 森下 政夫 (姫路工大) SiO<sub>2</sub>-CaO スラグのO K $\alpha$  X線発光スペクトルの計算にCaO濃度を取り入れる方法

(9:45~9:55) 休憩

(9:55~10:23) 分光 (III)

<座長 : 森下 政夫>

C6 寺師 大輔 (早大理工)

Satellite-free O K emission spectra from O-bearing compounds

C7 山下 大輔 (早大理工)

Characterization of Fe-bearing compounds in aerosol using Fe L emission spectra

C8 山本 昌輝 (京大工)

Cr<sup>3+</sup> 固体レーザー材料における多重項の第一原理計算

C9 藤村 幸司 (京大工)

Cr<sup>4+</sup> : Melilite 系結晶における光学スペクトルの第一原理計算

(10:23~11:30) ポスターセッション

(11:30~12:00) 総会・事務連絡・閉会の辞

# 第 13 回 DV-X $\alpha$ 研究会報告書

Reports of 13th DV-X $\alpha$  Annual Meeting

## 目次

番号	頁	講演者氏名						
A1	23	小和田善之	A12	70	荻原達也	B8	111	大場史康
A2	27	吉野正人	A13	75	湯川宏	B9	116	大串貞一郎
A3	32	劉軼	A14	80	杉原淳	B10	120	生駒俊之
A4	37	茂木昌都	A15	No.2	向山毅	B11	123	福田剛巳
A5	41	高橋靖彦	B1	84	中川克巳	B12	127	中野雅信
A6	46	久世智	B2	89	小笠原一禎	B13	132	森分博紀
A7	51	刀原寛孝	B3	91	福島公親	B14	137	石井知彦
A8	55	申ウソク	B4	96	牧野至洋	B15	142	大下祥雄
A9	57	中津川博	B5	100	中松博英	B16	147	尾上順
A10	62	内田陽子	B6	102	田中久美子			
A11	65	高原渉	B7	106	永田徳久			

※第 13 回 DV-X $\alpha$ 研究会のプログラムは 18-21 頁に掲載されています。

※A15 及び B17 以後の報告書は No.2 に掲載予定です。

DV-X $\alpha$ 研究協会会報, Vol. 13, No. 1 (2000)

---

2000年 12月 1日 発行

編集者 DV-X $\alpha$ 研究協会

発行人 DV-X $\alpha$ 研究協会

発行所 DV-X $\alpha$ 研究協会

〒531-0072 大阪市北区豊崎3丁目9番7号 いずみビル

(財) 泉科学技術振興財団 発行

振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会

印刷所 黒船印刷株式会社

〒422-8033 静岡市登呂二丁目4番25号

電話 054-386-0236

---

Bulletin of the Society for Discrete Variational X $\alpha$

Vol. 13, No. 1 (2000)

©The Society for Discrete Variational X $\alpha$ , Osaka, 2000



