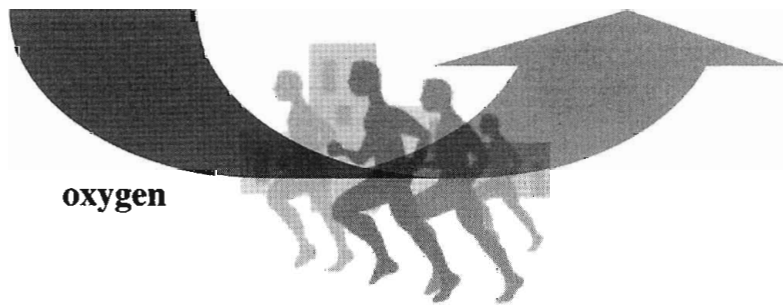
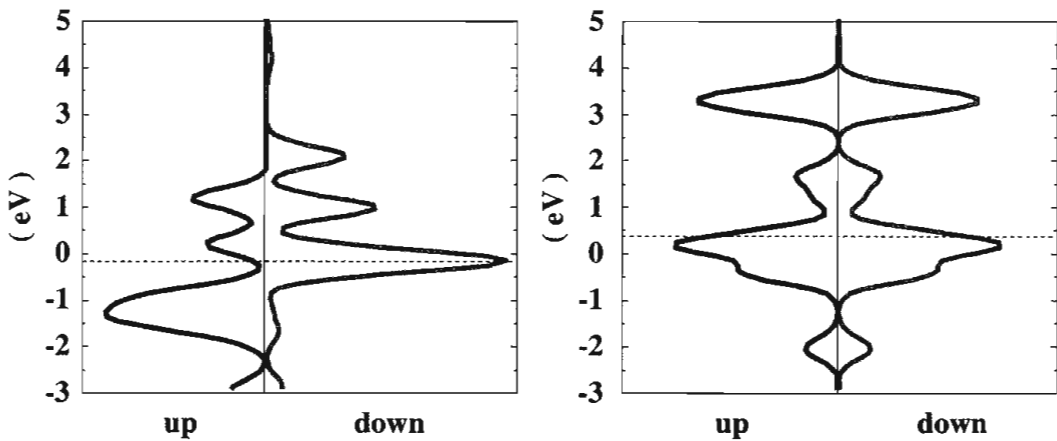


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

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

Vol.16, No. 1 (2003)



Electronic Density of States of Iron 3d Orbital in Hemoglobin.

DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α
Vol. 16, No. 1 (2003)

目次

2003 年度 学術賞、功績賞、奨励賞	1	
・ ・ ・ DV-X α 研究協会各賞選考について 宇田 宥之	1	
・ ・ ・ 第 3 回 DV-X α 研究協会学術賞 河合 潤	2	
・ ・ ・ 第 2 回 DV-X α 研究協会功績賞 脇田久伸	5	
・ ・ ・ 第 9 回 DV-X α 研究協会奨励賞 石井知彦	7	
・ ・ ・ 第 9 回 DV-X α 研究協会奨励賞 吉野正人	10	
解説記事 分子の X 線吸収・放出スペクトル<第 2 回学術賞> 向山 毅	13	
第 16 回 DV-X α 研究会報告書		
・ ・ ・ はじめに	物質・材料研究機構 大橋直樹・田中順三	25
・ ・ ・ 講演プログラム		27
・ ・ ・ 参加者名簿		31
・ ・ ・ 集合写真		34
・ ・ ・ 講演番号 Index		35
・ ・ ・ 研究会報告書 O-1p01~O-3a03		37
	(O-3a04 以後は No.2 に掲載予定です)	
編集後記		巻末

編集 DV-X α 研究協会

講演プログラム

口頭発表の部 (独立行政法人物質・材料研究機構 千現地区 第一会議室)

8月6日

- 14:00~15:00 一般セッション① 座長 石井 知彦
- O-1p01 Agイオン伝導帯中のAgイオンの結合状態と伝導パス
小和田 善之*, 岡本 幹*, 辰巳砂 昌弘**, 南 努**, 田中 功***, 足立 裕彦***
*兵庫教大, **阪府大, ***京大・工
- O-1p02 層状化合物 $\text{LiCo}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ の電子状態
藪内 直明, 小槻 勉,
大阪市大院・工
- O-1p03 ナノポーラス化合物 $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ に包接されたイオンの電子状態
神谷 利夫***, 林 克郎**, 松下 聡***, 平野 正浩**, 細野 秀雄***
*東工大・応セラ研, ERATO 細野電子活性
- O-1p04 電子密度分布に見られるユニバーサルな関係
吉野 正人*, 岡林 功介**, 下出 晃広**, 森永 正彦*, 中松 博英***, 関根 理香****
*名大・工, **名大・院, ***京大・化研, ****静大・理
- 15:00~15:40 招待講演① 座長 足立 裕彦
- S-1p01 ナノテクノロジーとDV-X α
平尾 一之 京大院・工
- 16:00~17:00 特別講演①② 座長 田中順三
- S-1p02 NIMS 計算材化学研究センターの研究紹介
小野寺 英博 NIMS・計算材料セ
- S-1p03 NIMS 計算センターでの第一原理研究の紹介
大野 隆央 NIMS・計算材料セ

8月7日

- 9:00~10:15 一般セッション② 座長 水野 正隆
- O-2a01 DV-X α 分子軌道法を用いたポルフィリン化合物の状態分析
山重 寿夫*, 栗崎 敏, 脇田 久伸***
*福岡大・理, **福岡大・高機能研
- O-2a02 8-キノリノールまたはその誘導体を配位子とするモリブデンクラスター錯体の電子状態
廣氏 芳雄, 川崎 秀樹, 坂根 弦太, 柴原 隆志
岡山理大・理
- O-2a03 亜鉛(II)錯体のX線光電子分光スペクトルと分子軌道計算
野津 智博, 鶴目 宣孝*, 宮武 智弘, 藤原 学, 松下 隆之
龍谷大・理工
- O-2a04 銅(II)シッフ塩基錯体のX線光電子分光スペクトルと分子軌道計算
鶴目 宣孝, 武田 照美, 山口 敏弘, 浅田 英幸, 藤原 学, 松下 隆之
龍谷大・理工
- O-2a05 3d遷移金属フタロシアニンの3d電子状態計算
越野 雅至, 倉田 博基, 磯田 正二
京大・化研
- 10:30~11:30 一般セッション③ 座長 越野 雅至
- O-2a06 Fe-B化合物の ^{57}Fe メスバウアー分光と得られた超微細相互作用パラメータのDV-X α 計算
世木 隆*, 那須 三郎*, 森本 正太郎*, 所 久人**
*阪大・基礎工, **日立金属
- O-2a07 CuAlおよびCoTiにおける構造欠陥に関する第一原理計算
水野 正隆, 荒木 秀樹, 白井 泰治
阪大・工
- O-2a08 有機・無機複合電子系における高スピン・低スピンの解明

- 石井 知彦, 近藤 和志, 東 達矢
香川大・工
- O-2a09 有機・無機磁性体における分子強磁性・反強磁性相互作用の解明
近藤 和志, 石井 知彦
香川大・工
- 11:30~12:00 特別講演③ 座長 大橋 直樹
- S-2a01 リン酸カルシウム/生体高分子複合界面設計と生体材料
生駒 俊之, 田中 順三 NIMS・生体材料セ
- 13:15~14:15 一般セッション④ 座長 河合 潤
- O-2p01 DV-X α 法の新たな展開 —SCF 計算から一多電子状態計算へ—
足立 裕彦
京大・工
- O-2p02 磁場を考慮した DV-X α 法および DV-ME 法計算プログラムの開発
小笠原 一禎*, 池野 豪一**, 足立 裕彦**
*関学・理, **京大・工
- O-2p03 DV-X α 法による分子の全エネルギー計算(2) スピン系への拡張
中川 克己
キヤノン・エコ研
- O-2p04 クラスタモデルにおける電子有効質量の評価方法(その2)
安井 潤*, 富田 匠**, 山下 和芳**, 早藤 貴範**
*東洋紡・総研, **関学・理工
- 14:15~15:15 一般セッション⑤ 座長 小笠原 一禎
- O-2p05 DVSCAT の C++へのソースコード変換と MPI による並列処理
野村 重孝*, 神山 典久**, 甲斐 宗徳**, 遠藤 三郎*
*東理大・工, **成蹊大・工
- O-2p06 γ 相金属ウラン-遷移金属合金の電子構造
栗原 正義*, 平田 勝**, 関根 理香***, 尾上 順****, 中松 博英*****
*日環協, **原研, ***静大・理, ****東工大・原子炉研, *****京大・化研
- O-2p07 ULSI 電極材料チタンシリサイドの構造相転移(2)
田中 恵一*, 柏木 伸介*, 清家 聖嘉**, 木崎 栄年**, 早藤 貴範*
*関学院・理, **阪大・産研
- O-2p08 界面トラップに対する絶縁膜構成原子とシリコン原子の結合状態の影響
川中 康弘, 吉田 晴彦, 岸野 正剛
姫路工大院・工
- 15:35~16:15 招待講演② 座長 神谷 利夫
- S-2p01 古典分子動力学法計算の原子間相互作用モデルについて
—その水、水溶液、無機化合物の水和への応用を含む—
河村 雄行 東工大・理
- 16:15~17:30 一般セッション⑥ 座長 小和田 善之
- O-2p09 In_2O_3 中の点欠陥とその電子状態
富田 匠*, 山下 和芳*, 安井 潤**, 早藤 貴範*
*関学院・理, **東洋紡・総研
- O-2p10 In_2O_3 中へのドーピング効果とその電子状態(2)
山下 和芳*, 富田 匠*, 安井 潤**, 早藤 貴範*
*関学院・理, **東洋紡・総研
- O-2p11 $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ の電子構造および熱電特性
山本 昌弘*, 湯藤 幸男*, 杉原 淳*, 山内 尚雄**
*湘南工大, **東工大
- O-2p12 金属酸化物の量子解析
福島 公親
東芝
- O-2p13 窒化ケイ素セラミックスの高温強度特性に及ぼす Ca 元素の影響について
高原 涉, 岡田博之, 南 二三吉
阪大・工

8月8日

- 9:00~10:15 一般セッション⑦ 座長 安井 潤
- O-3a01 半導体クラスターにおける点欠陥集合体の電子状態(7)
高尾 将和, 跡路 栄作, 川口 真寛, 佐藤 大輔, 早藤 貴範
関学院・理
- O-3a02 半導体クラスターにおける点欠陥集合体の電子状態(8)
佐藤 大輔, 跡路 栄作, 川口 真寛, 高尾 将和, 早藤 貴範
関学院・理
- O-3a03 半導体クラスターにおける点欠陥集合体の電子状態(9)
跡路 栄作, 佐藤 大輔, 高尾 将和, 早藤 貴範
関学院・理
- O-3a04 半導体クラスターにおける点欠陥集合体(10)
川口 真寛*, 佐藤 大輔*, 高尾 将和*, 西谷 滋人**, 早藤 貴範*
*関学院・理, **京大院・工
- O-3a05 ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算(1)
中尾 亮, 石角 圭祐, 寺内 暉, 早藤 貴範
関学院・理
- O-3a06 DV-X α 法を用いた各種TiO₂の構造解析
田淵 弘太郎, 山重 寿夫, 坂口 奈保美, 栗崎 敏, 脇田 久伸
福岡大・理, 福岡大・高機能研

ポスター発表の部 (独立行政法人物質・材料研究機構 千現地区 第二会議室)

8月6日 17:00~18:30 ポスターセッション①

8月7日 17:30~18:00 ポスターセッション②

- P-01 **Effect of Dopants on electric structure at surface**
LEE, Dong-Yoon, Won-Jae Lee, Jae-Sung Song
KERI, Korea
- P-02 半導体クラスターにおける点欠陥集合体の電子状態(11)
江刺 昇, 高尾 将和, 跡路 栄作, 川口 真寛, 佐藤 大輔, 早藤 貴範
関学院・理
- P-03 TeO₂関連化合物の(超)分極率の計算
末原 茂*, 相澤 俊*, 菱田 俊一*, 小西 哲也*, 轟 真一*, 井上 悟*, P. Thomas**,
A. P. Mirgorodsky**, T. Merle-Mejéan**, J. C. Champarnaud-Mesjard**
*NIMS, **SPCTS-CNRS
- P-04 DV-X α 法による臭化物塩のBrL₃XANES解析
松尾 修司*, P. ナチムトゥ***, D.W. リンドル**, R. C. C. ペレラ***, 脇田 久伸*****
*福岡大・高機能研, **UNVL, ***LBNL, ****福岡大・理
- P-05 Mulliken Population 解析の拡張
安井 潤*, 清水 美和**, 早藤 貴範**
*東洋紡・総研, **関学・理工
- P-06 PESA 遠紫外分光法とは?
中島 嘉之****, 山下 大輔*, 橋本 雄一**, 田邊 浩**, 宇田 応之***
*理研計器, **キヤノン, ***早大・理工
- P-07 へき開MgO表面の大気中光電子分光スペクトル解析
佐藤 竜祐, 宇田 応之
早大・理工
- P-08 "H, O, F, NH₂で終端したダイヤモンド表面"の電子状態解析

- 石崎 温史, 宇田 応之
早大・理工
- P-09 **LaCl₃中の希土類イオンにおける多重項構造の第一原理計算**
酒井 幸, 小笠原 一禎
関学・理
- P-10 **LaF₃中の希土類イオンにおける多重項構造の第一原理計算**
坂根 聡, 小笠原 一禎
関学・理
- P-11 **LiYF₄類似結晶中の希土類イオンにおける多重項構造の第一原理計算**
豊島 広朗, 渡邊 真太, 小笠原 一禎
関学・理
- P-12 **YF₃中の希土類イオンにおける光学スペクトルの第一原理計算**
中村 明寛*, 小笠原 一禎*, 吉田 尚史**
*関学・理, **NEC ライティング
- P-13 **LiYF₄中の希土類イオンにおける 4fⁿ-4fⁿ⁻¹5d¹遷移スペクトルの第一原理計算**
渡邊 真太, 豊島 広朗, 小笠原 一禎
関学・理
- P-14 **Gd付活UV-B紫外蛍光体の発光特性と構造解析**
吉田 尚史*, 高松 良*, 小笠原 一禎**
*NEC ライティング, **関学・理工
- P-15 **LiNiO₂のLi挿入・脱離に伴う電子状態変化**
池野豪一*, 小山 幸典**, 溝口 照康***, 小笠原 一禎****, 田中 功*, 足立 裕彦*
*京大・工, **名大・工, ***京大・工, ****関学・理工
- P-16 **SnL α 1 x-ray fluorescence spectra of Sn, SnO and SnO₂**
弓削 是貴, Zhenlin LIU, 河合 潤
京大・工
- P-17 **ハイドロキシアパタイト/有機マトリックス間の界面相互作用**
佐藤 公泰*, 熊谷 友里*, 小暮 敏博**, 渡利 広司**, 田中 順三*
*NIMS, **産総研
- P-18 **トリフェニルホスフィン誘導体のX線光電子スペクトルと分子軌道計算**
藤原 学*, 山庄司 由子**, 松下 隆之*
*龍谷大・理工, **阪大院・工
- P-19 **縮合多環式芳香族化合物の軟X線スペクトルと分子サイズとの相関**
村松 康司
原研・関西研
- P-20 **密度汎関数法によるAu,Ptクラスターの構造及び酸素の反応性**
森澤 貴紀*, 田中 久美子***, 関根 理香*
*静大・理, **原研
- P-21 **超アクチノイド元素ラザホージウムの化学的安定性**
平田 勝*, 永目 諭一郎*, 羽場 宏光**, 平井 利幸***, 工藤 久昭***
*原研, **理研, ***新潟大
- P-22 **第一原理分子動力学法による異方的圧縮下での物質の電子状態及び格子構造の挙動の計算**
小林 一昭*, 新井 正男*, 佐々木 泰造*, 山本 一雄**
*NIMS, **神奈川工大
- P-23 **MgO表面へのRu, Pd, Agの吸着エネルギー解析**
田中 久美子***, 平田 勝**, 関根 理香*, J. Anton***, B. Fricke***
*静大・理, **原研, ***カッセル大
- P-24 **Ruクラスターの磁性**
伊藤 伸一
京都教育大
- P-25 **Al化合物のKLVオージェスペクトルの微細構造解析**
茂木 昌都*, 佐藤 誓*, 山本 知之**
*日産アーク, **京大

第 16 回 DV-X α 研究会報告書

Reports of 16th DV-X α Annual Meeting

目次

番号	頁	講演者氏名						
O1p01	37	小和田善之	O2a07	70	水野正孝	O2p06	110	栗原正義
O1p02	41	藪内直明	O2a08	75	石井知彦	O2p07	115	田中恵一
O1p04	46	吉野正人	O2a09	80	近藤和志	O2p08	120	川中康弘
O2a01	49	山重寿夫	O2p01	84	足立裕彦	O2p09	125	富田匠
O2a02	52	廣氏芳雄	O2p02	90	小笠原一禎	O2p10	130	山下和芳
O2a03	56	野津智博	O2p03	93	中川克己	O2p11	136	山本昌弘
O2a04	61	鶴目宣孝	O2p04	98	安井潤	O2p12	141	福島公親
O2a05	66	越野雅至	O2p05	106	野村重孝	O3a01	146	高尾将和
						O3a02	151	佐藤大輔

※第一著者（講演者）の名前のみしめしました。

※ O2p13 及び O3a03 以後の講演番号の報告書は No.2 に掲載予定です。

<編集後記>

* DV-X α 研究協会会報, Vol. 16, No. 1 をお届けします。

* 本号の表紙は香川大学工学部材料創造工学科の石井知彦先生にお願いしました。

* 本号の発行が大幅に遅れてしまいました。育児休業取得に伴い変則的な編集体制にしたためです。編集の仕事を一部肩代わりしてくれた、独立行政法人 物質・材料研究機構 物質研究所の 大橋直樹先生、京都大学福井謙一記念研究センターの山本知之博士に心よりお礼申し上げます。

* 会報についてのご意見は遠慮なく下記へお寄せください。

静岡大学 理学部化学科 関根理香

電子メール scrseki@ipc.shizuoka.ac.jp

DV-X α 研究協会会報, Vol. 16, No. 1 (2003)

2004年 2月 15日 発行

編集者 DV-X α 研究協会

発行人 DV-X α 研究協会

発行所 DV-X α 研究協会

〒531-0072 大阪市北区豊崎 3-10-2 I & F 梅田 1004

(財) 泉科学技術振興財団気付

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 2 5号

電話 054-286-0236

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

Vol. 16, No. 1 (2003)

©The Society for Discrete Variational X α , Osaka, 2003

ISSN 1346-5015

