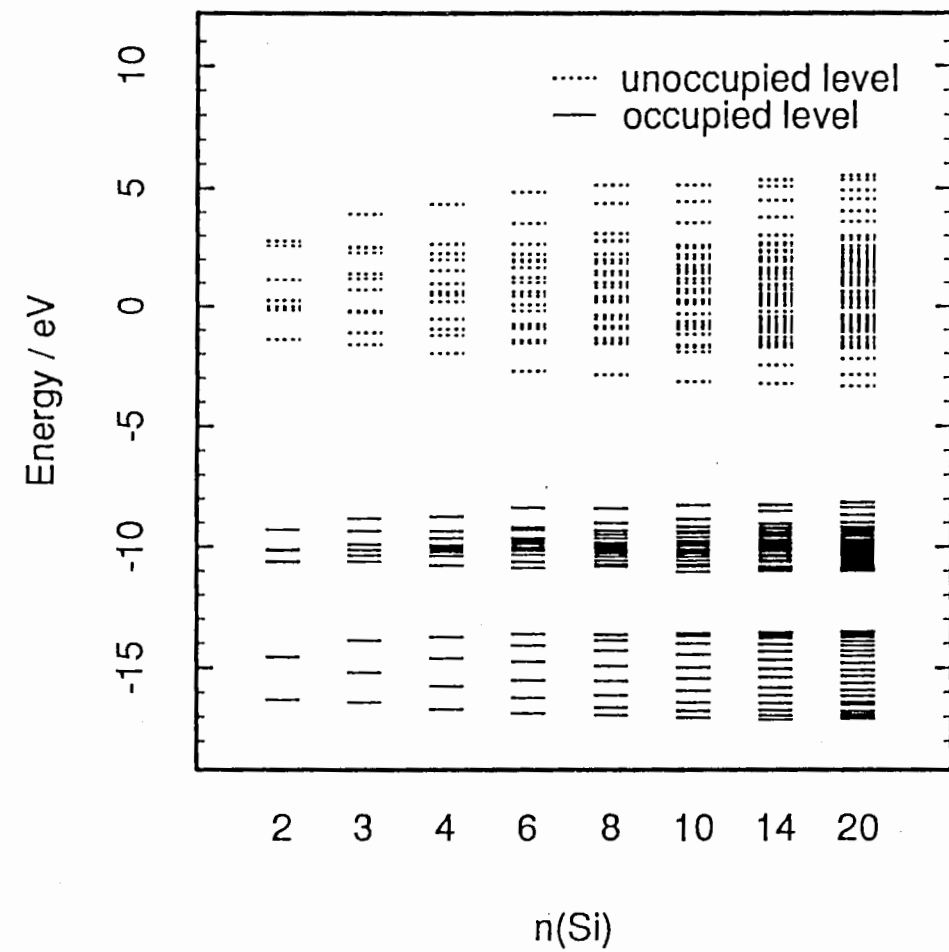


1991年度 DV- X_α 研究会

1次元シリコン鎖 $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$ のエネルギーレベル



第4回 DV-X α 研究会

1991

平成3年 8月5日 (月) ~ 7日 (水)

蒲郡市 サンヒルズ三河湾

DVX α

第4回 DV-X α 研究会 プログラム

会期：1991年8月5日(月)～7日(水)

場所：サンヒルズ三河湾 講演会 三ヶ根(2階)
ポスター会場 遠望峰(2階)

登壇者のみ記載(共同研究者は当日の講演または、報告書をご覧ください。)

講演時間 討論時間
分 分

8月5日(月)

- 2:00～ 3:15 座長 向山 毅
1. 中松博英 20 10 分子のXANES(X線吸収スペクトル)
 2. 石川英明 20 10 ホスフィンとツボランの電子構造及び光吸収スペクトルの計算
 3. 脇田久伸 10 5 銅(II)大環状錯体のXAFSスペクトルとDV-X α 計算

3:15～ 3:35 休憩

- 3:35～ 4:50 座長 藤間一美
4. 河合 潤 20 10 分子軌道法による蛍光X線スペクトルの計算
 5. 茂木昌都 20 10 FK α サテライトスペクトルにおける化学結合効果の機構
 6. 向山 毅 10 5 K β /K α X線強度比の化学結合効果

6:00 夕食

7:00～ ポスターセッション(ビールパーティ)

8月6日(火)

- 8:45～ 10:15 座長 宇田応之
7. 木村仁之 20 10 シリコンクラスターの電子状態
 8. 宮崎栄三 10 5 NbC(111)面の表面準位と化学吸着
 9. 坂根弦太 10 5 [MoCl₆]³⁻の電子状態
 10. 小和田善之 20 10 SiO₂-M_xO_y(M=P, Ti, Zr)系ガラスの電子状態

10:15～ 10:35 休憩

- 10:35～ 11:50 座長 那須三郎
11. 木下善弘 20 10 DV-X α 法を用いた溶液中のイオンの溶存構造の検討
 12. 田子一農 20 10 原子間結合エネルギーによる純金属摩耗の評価
 13. 森永正彦 10 5 アルミニウム合金の強度と電子状態

11:50～ 1:30 昼食

- 1:30～ 2:45 座長 森永正彦
14. 森下政夫 10 5 Ti合金の活性腐食速度と電子論に基づく結合次数との関係
 15. 山本一雄 10 5 Ni(111)上の単原子グラファイトの電子構造
 16. 齊藤淳一 20 10 金属間化合物TiAlの変形過程における電子状態
 17. 那須三郎 10 5 α -Fe中 split-dumbbellの電子状態

2:45～ 3:05 休憩

- 3:05～ 4:35 座長 宮崎栄三
18. 安井 潤 10 5 フェロセンの電子状態
 19. 中村 淳 10 5 化学結合の効果を検討した原子散乱因子の効果
 20. 江崎尚和 10 5 金属および金属間化合物の水素過電圧と電子状態
 21. 室岡英夫 10 5 原子のイオン化ポテンシャルについて
 22. 佐野 充 10 5 分子素子と金属錯体について
 23. 藤間一美 10 5 高密度、強磁場中の鎖状分子の物性

4:50～ 5:20 写真撮影

6:30～ 8:30 懇親会

8月7日(水)

- 8:45～ 10:00 座長 足立裕彦
24. 田中 功 20 10 窒化ケイ素系固溶体の電子状態と力学的特性
 25. 高橋昌男 10 5 窒化ニッケルの電子状態
 26. 福島公親 20 10 2次元金属酸化物の電子状態

10:00～ 10:20 休憩

- 10:20～ 11:50 座長 福島公親
27. 田辺哲朗 10 5 Zr, Tiの表面酸化
 28. 関根理香 20 10 超伝導酸化物のXANES
 29. 高野幹夫 10 5 Fe⁴⁺を含むペロブスカイト型酸化物の相転移
 30. 足立裕彦 10 5 金属酸化物の電子状態
 31. 内藤洋子 10 5 イオン-原子衝突の動径・回転結合行列と電荷移行断面積

11:50～ 12:00 討論、その他

12:00～ 昼食