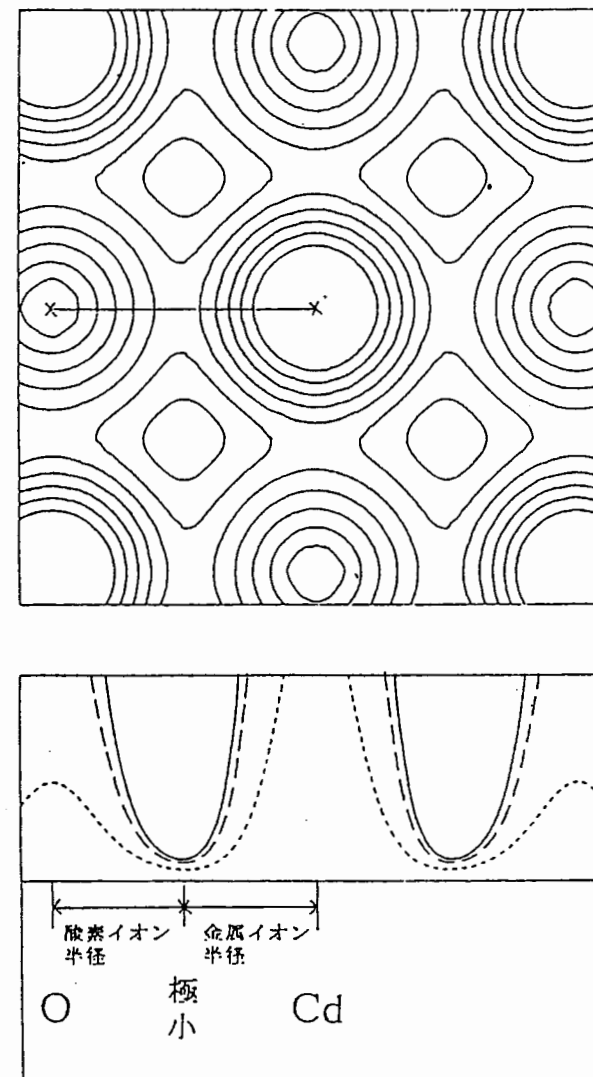


1992年度DV-X α 研究会



電子密度分布からイオン半径決定

第5回 DV-X α 研究会
1992

平成4年 8月4日(火)～6日(木)

早稲田大学国際会議場

DVX α

第5回 DV-X α 研究会 プログラム

会期：1992年8月4日（火）～6日（木）

場所：早稲田大学国際会議場（発表会場：井深大記念ホール ポスター会場：3F第1会議室）

登壇者のみ記載（共同研究者は当日の講演又は、報告書をご覧ください）

講演時間（講演時間に加えそれぞれ討論時間が5分あります）
分

8月4日（火）

2:00～3:25 座長 福島公親

- | | | | |
|---|------|----|--|
| 1 | 那須三郎 | 10 | メスバウアー分光とDV-X α |
| 2 | 茂木昌都 | 10 | SO $_2$ におけるSK β 及びSL $_{2,3}$ 線に対するcrossover項の寄与について |
| 3 | 三浦薫 | 15 | Co/Pd人工格子における磁気的相互作用 |
| 4 | 吉田暢生 | 15 | 窒素4配位銅(II)錯体のXANESスペクトル解析 |
| 5 | 小清水亮 | 10 | GaAs/Ga $_2$ Se $_3$ Heterovalent界面再配列構造への分子軌道計算(DV-X α 法)の適用 |

3:25～3:45 休憩

3:45～4:45 座長 那須三郎

- | | | | |
|---|------|--|----------------|
| 6 | 森永正彦 | | クラスター理論による合金設計 |
|---|------|--|----------------|

6:30～7:30 ポスターセッション
(活発な討論をお気に召すまで[最終9:00])

8月5日（水）

9:30～10:55 座長 河合潤

- | | | | |
|----|-------|----|--|
| 7 | 福島公親 | 10 | 超伝導体中の絶縁体の電子状態計算 |
| 8 | 武石玲子 | 10 | ZnSe中のアクセプター不純物の電子状態 |
| 9 | 田中ひかり | 15 | 金属酸化物の電子状態と酸素イオン半径 |
| 10 | 森口晃治 | 15 | CZ-Si中酸素原子の電子状態 |
| 11 | 此木秀和 | 10 | 四面体型CX $_4$ (X=F,Cl,Br,I)分子における正味の電荷移動 |

10:55～11:15 休憩

11:15～12:35 座長 宇田応之

- | | | | |
|----|------|----|--|
| 12 | 足立裕彦 | 10 | 種々の環境におけるクラスターの電子状態 |
| 13 | 中松博英 | 10 | 相対論DV-X α |
| 14 | 尾上順 | 15 | DV Dirac-Slater法を用いたUF $_6$ のUV光励起プロセス |
| 15 | 高橋昌男 | 10 | 遷移金属窒化物における価電子数と化学結合状態 |
| 16 | 井本英夫 | 10 | ルチル型酸化物の電子状態 |

12:35～2:00 昼食

2:00～3:15 座長 森永正彦

- | | | | |
|----|-------------------|----|--|
| 17 | 田中順三 | 15 | ZnO:Bi $_2$ O $_3$ 系粒界のオージェ電子スペクトルの解析 |
| 18 | 尾関徹 | 15 | 可視・紫外吸収スペクトルから推定した6a族金属オキシ酸(クロム酸モリブデン酸)イオンの溶存構造と電子状態について |
| 19 | 河合潤 | 15 | バックミンスターフラレン(C $_{60}$)およびフラライドの発光X線スペクトル |
| 20 | Diana Guenzburger | 10 | Localized Magnetic Properties of Alloys |

3:15～3:35 休憩

3:35～4:35 座長 足立裕彦

- | | | | |
|----|-----------|--|----|
| 21 | Don Ellis | | 未定 |
|----|-----------|--|----|

4:50～5:20 写真撮影

6:30～8:30 懇親会

8月6日（木）

9:30～10:50 座長 関根理香

- | | | | |
|----|-------|----|---|
| 22 | 坂根弦太 | 10 | 不完全キューバン型モリブデンアクア錯体[Mo $_3$ X $_4$ (H $_2$ O) $_9$] $^{4+}$ (X=O,S)の電子状態 |
| 23 | 室岡英夫 | 10 | 水和陽イオンの電子状態I. アルカリおよびアルカリ土類金属イオン |
| 24 | 小和田善之 | 10 | SiO $_2$ ガラス中の遷移金属イオンの電子状態 |
| 25 | 宇田英一郎 | 15 | 硫黄化合物蛍光X線スペクトルの計算 |
| 26 | 安井潤 | 10 | 二原子分子の分子軌道相関図 |

10:50～11:10 休憩

11:10～12:25 座長 早藤貴範

- | | | | |
|----|-------|----|-------------------------------------|
| 27 | 三谷智子 | 15 | Si(001)面上のTeの吸着構造 |
| 28 | 石川英明 | 10 | V族水素化物の光吸収スペクトルと光分解 |
| 29 | 佐藤宏 | 15 | 炭素内殻準位のシフトに及ぼす電荷移動の効果～メタン系分子を中心として～ |
| 30 | 海老原俊一 | 15 | 2結晶分光器におけるブラッグ角の自動制御 |

12:25～12:35 討論、その他