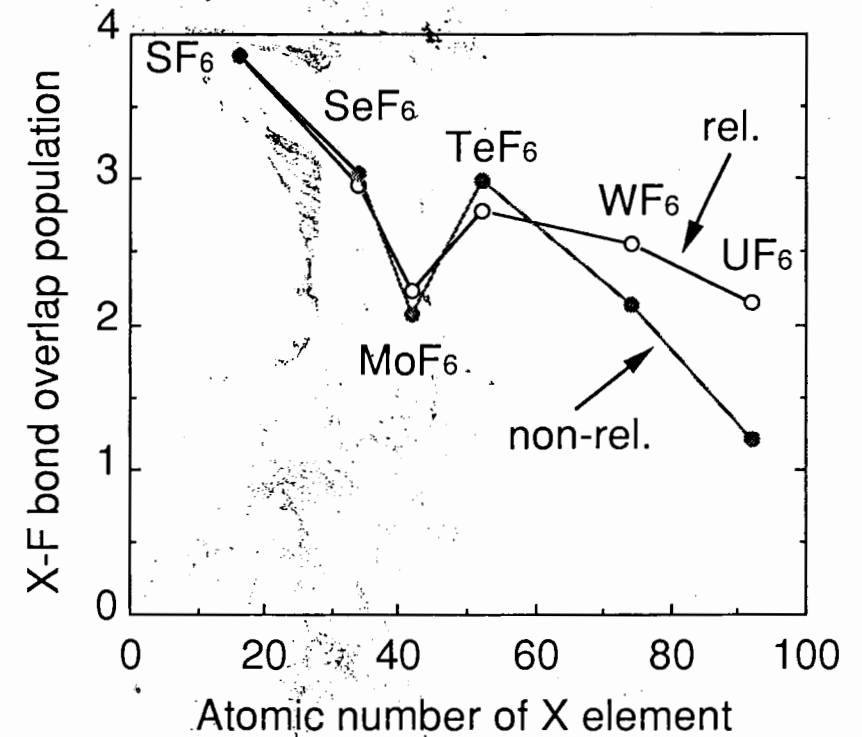


# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

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

Vcl.6, No.1 (1993)



# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

Vol.6, No.1

1993年

第6回DV-X $\alpha$  研究会報告書

(1993年7月29日～31日, 京都)

編集 DV-X $\alpha$  研究協会

**DVX $\alpha$**

第6回DV-X $\alpha$ 研究会プログラム (登壇者のみ記載)

会期: 1993年7月29日(木)~31日(土)

会場: 京都バストラル, 葵の間

〒603 京都市北区衣笠北天神森町21 tel 075-462-7746 (代)

7月29日(木)

13:00 開会の挨拶(足立裕彦)

13:10~14:10 (座長: 高橋昌男)

- 1A. 河合 潤(京大工)  $B_{13}P_2$ のP原子位置の決定
- 2B. 白井光雲(阪大産研) アモルファスホウ素の電子状態
- 3A. 茂木昌都(早大理工) 遷移金属と結合しているフッ素のFKの $K^1L^1$ サテライトスペクトルの強度減少機構
- 4A. 太田宏和(早大理工) DV-X $\alpha$ クラスター計算を用いたSiタイトバインディング計算
- 5A. 石川英明(富士通研究所) 分子の光吸収スペクトル計算の光CVDへの応用

14:10~14:50 (座長: 小和田善之)

- 6A. 高橋昌男(阪大産研) TiN-AIN窒化物薄膜の機能と電子状態
- 7A. 田中 功(京大工)  $Si_3N_4$ およびその固溶体の電子状態
- 8A. 関根理香(理研) 金属マイクロクラスターの構造と電子状態
- 9A. 宮崎榮三(東工大) SiN膜の電子状態

14:50~15:20 コーヒーブレイク

15:20~15:50 (座長: 沼倉 宏)

- 10A. 那須三郎(阪大基礎工) Fe中Nの電子状態
- 11B. 八重樫利武(京大工) fcc-Feクラスターの磁性
- 12A. 三浦 薫(ソニー)  $Fe_{16}N_2$ の磁気能率計算

15:50~16:40 (座長: 関根理香)

- 13A. 森下政夫(姫工大工) アルカリ金属およびアルカリ土類金属の溶融塩化物の電子状態
- 14B. 沼倉 宏(京大工) 金属中の水素-不純物複合体の電子状態
- 15A. 足立裕彦(京大工) 希薄Ag合金の内部酸化

16:40~18:30 ポスターセッション (葵の間)

21:00~ 自由討論

7月30日(金)

9:00~9:50 (座長: 石川英明)

- 16B. 松永克志(京大工) NaCl結晶における結合状態と破壊
- 17A. 望月正文(早大理工) 化合物を形成している第3周期元素の $K\beta$ スペクトルの強度計算
- 18A. 山本知之(早大理工) SCA(半古典近似)を用いた多重電離確率の見積もり
- 19A. 田中順三(無機材研) 酸化物酸素のオージェ電子分光

9:50~10:10 コーヒーブレイク

10:10~11:10 (座長: 井本英夫)

- 20B. 繁実章夫(龍谷大) COのshakeup理論計算
- 21B. 津嶋克年(福岡大理) 窒素を配位原子とする平面性ニッケル(II)錯体のXANESスペクトル解析
- 22A. 中松博英(京大化研) X線吸収スペクトルと原子間距離
- 23A. 脇田久伸(福岡大理) 窒素を配位原子とする銅(II)錯体のXANESスペクトル解析

11:10~12:00 (座長: 尾関 徹)

- 24A. 尾上 順(理研) 化学結合における相対論的効果
- 25B. 井上武洋(京大工)  $Al_3Ti$ の電子状態
- 26A. 木村仁史(ソニー) ZnSe中の格子間N,Oの電子状態
- 27A. 福島公親(東芝) 磁束のピン止め中心の電子状態計算

13:00~14:00 (座長: 藤間一美)

- 28C. 早藤貴範(ソニー) シミュレーションによる研究活動の変革-企業研究所での材料, 素子開発-

14:00~14:10 DV-X $\alpha$ 研究協会総会

14:10~15:10 (座長: 尾上 順)

- 29B. 小林 玲(京大工) バナジウム酸化物の電子状態
- 30B. 坂井全弘(松下中研) 導電性酸化物の電子状態
- 31A. 山本一雄(無機材研)  $\alpha$ -Sn/InSb(111)A-(2X2)系における新しい界面モデルの検討
- 32A. 三谷智子(東ソー) Teを用いたGe surfactant成長表面の構造

15:10~16:00 金閣寺(写真)

16:00~17:30 ポスターセッション

18:00~20:00 懇親会

21:00~ 自由討論

7月31日(土)

9:00~10:00 (座長: 山本一雄)

- 33B. 中村 淳(早大理工) 単原子層グラファイト/SiC(111)A系界面の電子論的評価
- 34B. 柘植清志(東大理) モリブデン硫黄クラスター錯体の電子状態
- 35B. 成瀬義幸(岡山理大理) 混合金属キュバン型錯体  $[Mo_3FeS_4(H_2O)_{10}]^{4+}$  の電子状態

10:00~10:20 コーヒーブレイク

10:20~11:00 (座長: 神谷利夫)

- 36B. 里岡 浩(信州大工) 酸化物触媒によるアルコールの転化反応-B酸点およびL酸点とエタノールの相互作用-
- 37A. 尾関 徹(兵教大) クロム酸-モリブデン酸の可視・紫外吸収スペクトルと電子状態
- 38A. 坂根弦太(岡山理大理) ニッケル・モリブデン・クラスター錯体の電子状態

11:00~11:50 (座長: 中松博英)

- 39A. 小和田善之(兵教大) テルライトガラスの電子状態
- 40B. 近藤鋭治(コンピュータテクノロジーインテグレイタ) 計算精度向上の試み
- 41A. 安井 潤(東洋紡) スレーター関数による数値的原子軌道関数の展開
- 42A. 森永正彦(豊橋技科大) クラスター法による亜鉛合金の強度予測
- 43A. 藤間一美(山梨大) 分子のGOSの計算

12:00~12:10 会議のまとめ(足立裕彦)

(A:発表7分, 討論3分, B:発表15分, 討論5分, C:発表50分, 討論10分)

DV-X $\alpha$  研究協会会報, Vol. 6, No. 1

- 第6回 DV-X $\alpha$  研究会報告書

---

1993年10月1日 発行

定 価 5000円 (本体4855円)

編集者 DV-X $\alpha$  研究協会

発行人 足立裕彦

発行所 DV-X $\alpha$  研究協会

〒606 京都市左京区吉田本町

京都大学工学部冶金学科鑄造冶金学研究室内

振 替 京都1-52330番 DVXA協会

印刷所 コスミック

---

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

Vol. 6, No. 1

© The Society for Discrete Variational X $\alpha$ , Kyoto, 1993