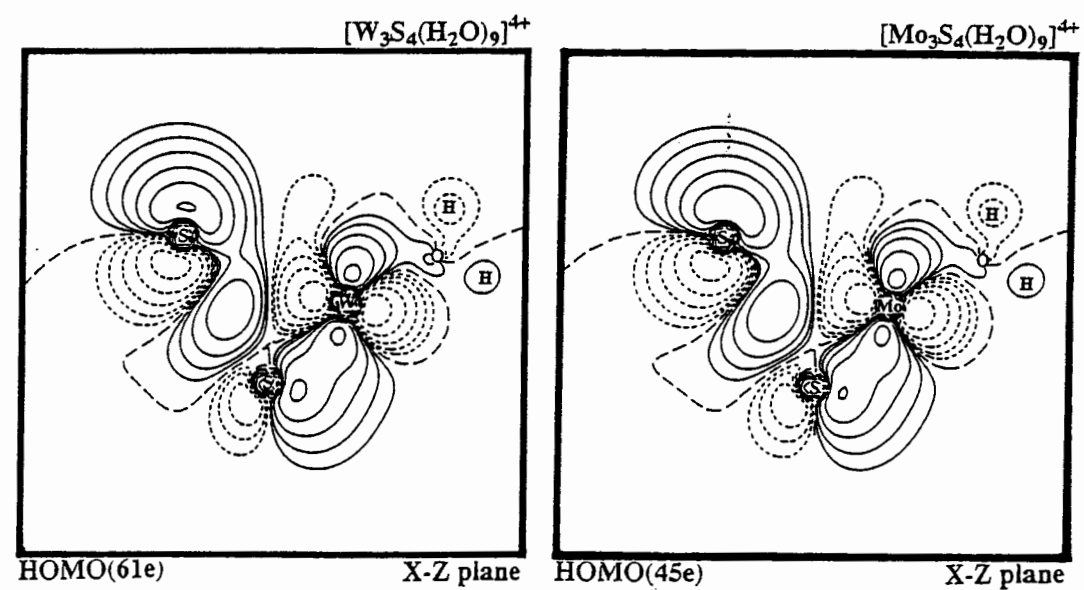


DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

Vol.7, No.1 (1994)



DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α
Vol. 7, No. 1 (1994)

はじめに

第7回DV-X α 研究会プログラム

第7回DV-X α 研究会参加者名簿

第4回「相対論効果」研究部会プログラム

第5回「相対論効果」研究部会プログラム

第7回DV-X α 研究会企画 パネルディスカッション「計算上のテクニック」

94年年会報告書 No.1~23 (No.24以降はVol.7, No.2に掲載します)

パソコンによるDV-X α 法の計算環境

1993年度DV-X α 研究協会会計報告

第7回DV-X α 研究会プログラム

会期：1994年8月3日(水)～5日(金)

会場：横浜ビジネスパーク ソニー株式会社 横浜テクノロジーセンター イーストタワー14F

(講演会場：146会議室 ポスター会場：146&145会議室)

〒240 横浜市保土ヶ谷区神戸町134

敬称略

登壇者のみ記載(共同研究者は当日の発表又は報告書をご覧下さい。)

講演時間：10分(発表5分、討論5分)

ポスターセッションは、原則的に3日、4日いずれも発表者全員が行います。

8月3日(水)

13:00-13:10 開会の挨拶

13:10-13:50 <座長：中松博英>

1. 長島 聡 (早大理工) 低エネルギー電子衝突の際の電離と電子付着
2. 望月正文 (早大理工) SCAにより単原子に対して求めた電離断面積の集合体への拡張
3. 池田隆司 (東大理工) 重アルカリ金属における内殻ホールの構造
4. 茂木昌都 (早大理工) DV-X α 法を用いたフッ化物のShake-off確率の見積り

13:50-14:40 <座長：関根理香>

5. 五十嵐万人 (京大工) α -Al₂O₃に固溶した3d遷移金属の電子状態
6. 鈴木知史 (京大工) 3d遷移金属酸化物の電子状態
7. 田中 功 (京大工) 電子エネルギー損失分光微細構造(ELNES)のシミュレーション
8. 中松博英 (京大化研) 希土類の化学結合、分子軌道とXANES
9. 篠原裕治 (信州大工) 金属酸化物表面上の吸着エタノールの電子状態

14:40-15:00 コーヒーブレイク

14:50-15:20 <座長：尾関 徹>

10. 樋高宏昭 (東ソー) Co²⁺-NO系における珪酸イオン、アルミン酸イオンの効果
11. 井本英夫 (東大理) [(Nb₆Cl₁₂)L₆]³⁺型化合物の電子状態
12. 三浦 薫 (ソニー) 低スピン状態及び高スピン状態をもつ正二十面体コバルトクラスターの計算

15:20-16:10 <座長：山本一雄>

13. 小澤健一 (東大理工) NbC(100)表面のアルカリ金属吸着状態
14. 南 貴博 (早大理工) NaCl(001)及びKCl(001)表面上でのAu原子の吸着サイト
15. 中澤秀司 (早大理工) InSb(111)B表面上での酸素の解離吸着
16. 中村 淳 (早大理工) Si(111)表面上のGe擬形態層に及ぼすSbの効果
17. 片岡 博 (東大理工) Si(111)面上の窒化膜の電子状態

16:10-17:30 ポスターセッション

8月4日(木)

9:00-9:10 事務連絡

9:10-10:10 <座長：井本英夫>

18. 山本武宏 (岡山理大理) 硫黄架橋不完全キュバン型タングステンクラスター錯体の電子状態
19. 坂根弦太 (岡山理大理) 硫黄架橋キュバン型モリブデンクラスター錯体の電子状態
20. 尾関 徹 (兵教大) bond orderによるオキシ酸の縮合反応の電子論的解釈
21. 金原 康治 (東大理工) CoCl₄²⁻錯体のd-d遷移
22. 丸山 陸弘 (東大理工) Ru(L)₂(CN)₂錯体のMLCT励起状態
23. 広津孝弘 (四国工技研) 2価遷移金属-ジアミノグリオキシム錯体のスピン状態

10:10-10:30 コーヒーブレイク

10:30-11:10 <座長：田中 功>

24. 松尾修司 (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-2-
25. 松本修治 (岡山大工) R₂O·SiO₂(R=Li,Na,K,Cs)ガラスにおける光電子スペクトルの解析
26. 山本知之 (早大理工) オーグメントの解析
27. 松永克志 (京大工) イオン結晶におけるF中心の電子状態

11:10-11:50 <座長：小和田善之>

28. 神戸直樹 (京大工) Fe中侵入型原子の電子状態
29. 森下政夫 (姫工大工) アルカリ金属および亜鉛の熔融フッ化物、臭化物、ヨウ化物の金属イオン周囲の局所的電子状態の検討
30. 福島公親 (東芝) 原子炉材料のコロージョンの電子状態計算
31. 森永正彦 (豊橋技科大) クラスタ法による発電プラント用高クロム・フェライト系耐熱鋼の設計と開発

11:50-12:50 LUNCH TIME

12:50-13:00 事務連絡

13:00-13:40 <座長：神谷利夫>

32. 藤間一美 (山梨大工) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み I.
- その目標と実現の方法 -
33. 山本一雄 (無機材研) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み II.
- 一中心三次元数値積分法と原子のエネルギー計算 -
34. 石川英明 (富士通研) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み III.
- 高精度多中心三次元数値積分法 -
35. 岩沢美佐子 (ソニー) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み IV.
- Beckeの勾配補正を導入した原子のエネルギー計算 -

13:40-14:10 <座長：石川英明>

36. 山口耕一郎 (京大化研) Wavelet基底を用いた電子状態計算
37. 安井 潤 (東洋紡) Slater軌道による数値的なHartree-Fock波動関数の解析的表現(2)
38. 小和田善之 (兵教大) 電場中のクラスター計算の試み

14:10-14:20 総会

14:20-14:50 写真撮影 + コーヒーブレイク

14:50-16:20 パネルディスカッション「計算上のテクニック」(進行 尾上 順)

16:20-17:30 ポスターセッション

18:00-20:00 懇親会(天王町 平安閣)

8月5日(金)

9:00- 9:10 事務連絡

9:10-10:00 <座長:三浦 薫>

- 39. 飛田守孝 (岡山大工) Sn クラスターの変形とその電子状態変化
- 40. 河合 潤 (京大工) 金属間化合物超伝導体の電子状態計算
- 41. 田所史郎 (京大工) h-BN 微結晶の電子状態
- 42. 後藤浩一 (日産自動車) DV-X α 法によるペロブスカイト型酸化物の電子状態計算
- 43. 那須三郎 (阪大基礎工) 新しい Fe-N 合金の磁性

10:00-10:20 コーヒーブレイク

10:20-11:00 <座長:森下政夫>

- 44. 水野正隆 (京大工) 3d 遷移金属炭化物の電子状態
- 45. 神谷利夫 (東工大工) DV-X α 法を用いた酸化物の Band 計算
- 46. 森戸健太郎 (早大理工) DV-X α 法を用いた Si のタイトバインディング・バンド計算
- 47. 足立裕彦 (京大工) 簡単な遷移金属クラスターの電子状態

11:00-11:50 <座長:河合 潤>

- 48. 栗原正義 (三菱原子燃料) 相対論的DV-X α 法によるウラン炭化物の電子状態解析
- 49. 平田 勝 (日本原子力研) 相対論的DV-X α 法による硝酸ウラニルの電子状態解析
- 50. 関根理香 (東工大理) 金属炭化物の電子状態
- 51. 尾上 順 (理研) UF₅ モノマーの構造と Bonding
- 52. 田中順三 (無機材研) アパタイトの分子軌道と AES

11:50-12:00 会議のまとめ

第7回DV-X α 研究会参加者名簿

日時: 1994年8月3日~5日

場所: ソニー株式会社 横浜テクノロジーセンター (横浜市保土ヶ谷区神戸町134)

敬称略

氏名	所属	
1. 朝比奈 均	三菱油化(株)	筑波総研 物性分析研究所
2. 足立 裕彦	京都大学	工学部 材料工学教室
3. 穴澤 俊久	東京工業大学	理学部 化学科 宮崎研究室
4. 五十嵐 万人	京都大学	工学部 材料工学科 材料設計工学研究室
5. 池田 隆司	東京工業大学	理学部 物理学科
6. 石川 英明	(株)富士通研究所	
7. 石田 雅也	住友化学工業(株)	筑波研究所
8. 稲場 秀明	川崎製鉄(株)	
9. 井上 真也	岡山大学	工学部 精密応用化学科
10. 今永 俊治	ソニー(株)	超LSI研究所 先端素子研究部
11. 今村 元泰	工業技術院	物質工学工業技術研究所
12. 井本 英夫	東京大学	理学部 化学教室
13. 岩沢 美佐子	ソニー(株)	中央研究所 計算科学センター
14. 岩淵 研吾	(財)鉄道総合技術研究所	立松研究室
15. 宇田 応之	早稲田大学	理工学部 材料工学科 宇田研究室
16. 大倉 公一	(株)クボタ	技術開発研究所
17. 大坂 敏明	早稲田大学	理工学部 材料技術研究所 材料工学科
18. 大橋 直樹	東京工業大学	工学部 無機材料工学科
19. 大森 郷志	早稲田大学	理工学部 物理学科 上江洲研究室
20. 岡村 一広	松下電池工業(株)	技術研究所
21. 長田 和男	(株)クボタ	技術開発研究所
22. 尾関 徹	兵庫教育大学	自然系
23. 尾関 智二	東京工業大学	資源化学研究所
24. 尾上 順	理化学研究所	分離工学研究室
25. 小澤 健一	東京工業大学	理学部 化学科 枝元研究室
26. 海津 洋行	東京工業大学	理学部 化学科
27. 片岡 博	東京工業大学	理学部 化学科 宮崎研究室
28. 金原 康治	東京工業大学	理学部 化学科 海津研究室
29. 神谷 利夫	東京工業大学	工学部 無機材料工学科
30. 河合 潤	京都大学	工学部 材料工学教室
31. 川崎 晋司	信州大学	繊維学部 素材開発化学科
32. 木村 仁史	ソニー(株)	中央研究所 計算科学センター
33. 木村 雅彦	(株)村田製作所	技術開発本部 第二開発グループ 開発一部 開発四課
34. 栗原 正義	三菱原子燃料(株)	技術部
35. 神戸 直樹	京都大学	工学部 冶金学専攻
36. 後藤 浩一	日産自動車(株)	基礎研究所
37. 小和田 善之	兵庫教育大学	自然系
38. 斉藤 淳一	動力炉・核燃料開発事業団	大洗工学センター 先進技術開発室
39. 坂根 弦太	岡山理科大学	理学部 化学科 柴原研究室
40. 篠原 裕治	信州大学	工学部 物質工学科 化学情報解析講座

DV-X α 研究協会会報, Vol. 7, No. 1 (1994)

1994年11月1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

〒606-01 京都市左京区吉田本町

京都大学大学院工学研究科材料工学教室材料設計工学系付

振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会

印刷所 コスミック

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

Vol. 7, No. 1 (1994)

©The Society for Discrete Variational X α , Kyoto, 1994