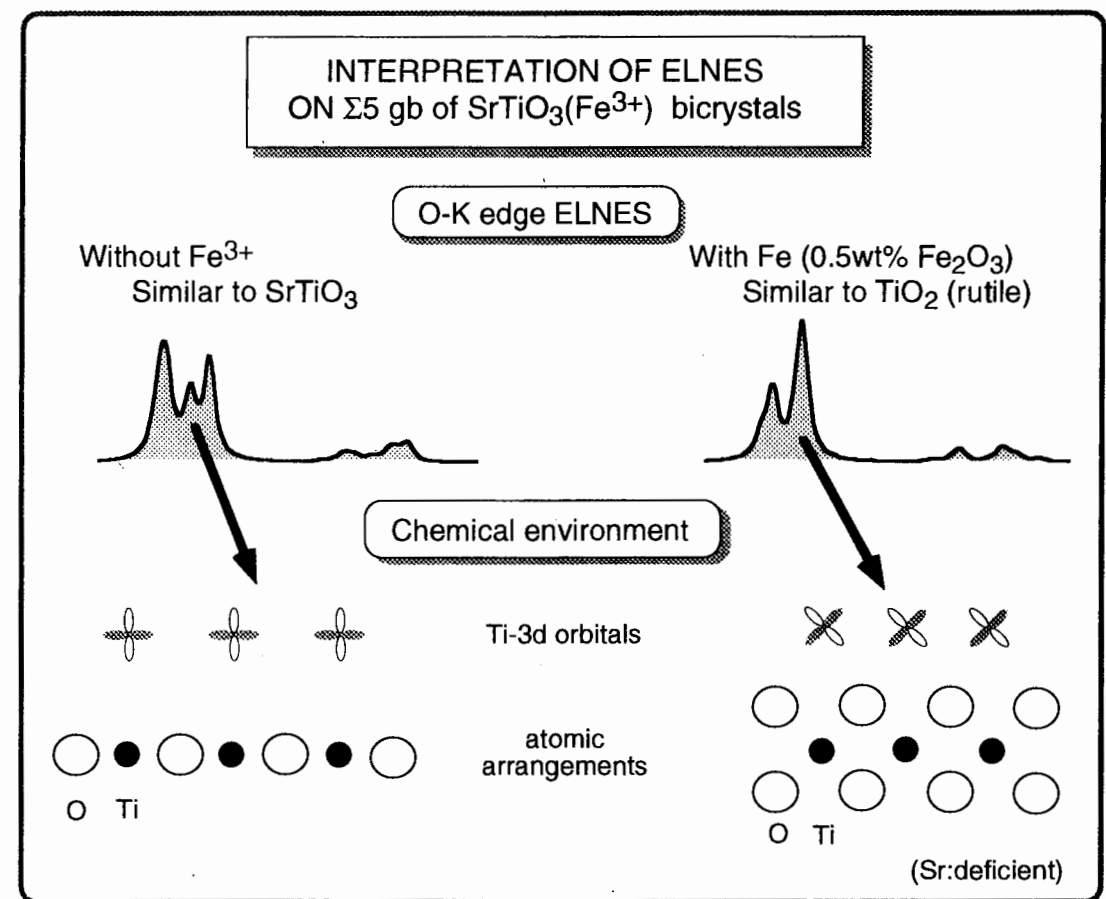


# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

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

Vol.8, No.1 (1995)



# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X $\alpha$   
Vol. 8, No. 1 (1995)

はじめに

第8回DV-X $\alpha$ 研究会プログラム

第8回DV-X $\alpha$ 研究会参加者名簿

第1回DV-X $\alpha$ 研究協会奨励賞 小和田善之氏 坂根弦太氏

95年年会報告書 特別講演, 招待講演, 一般講演

No.1~21 (No.9, No.22以降はVol.8, No.2に掲載します)

ANONYMOUS FTP 使用法

対称軌道作成ソフトsymOrbのバージョンアップのお知らせ

研究部会報告

第9回「相対論効果」研究部会報告

第1回「分光」部会報告

第1回「材料開発」部会報告

1994年度DV-X $\alpha$ 研究協会 会計報告

DV-X $\alpha$ 研究協会 奨励賞細則

DV-X $\alpha$ 研究協会事務局より

## 第8回 DV-X $\alpha$ 研究会プログラム

会期： 1995年 8月3日(木)～5日(土)

会場： 福岡大学文系センター4階 第4会議室  
〒814-80 福岡市城南区七隈 8-19-1

### 敬称略

登壇者のみ記載(共同研究者は当日の発表または報告書をご覧ください)

講演時間： 特別講演 45分 (発表40分、質疑応答5分)  
招待講演 30分 (発表25分、質疑応答5分)  
一般講演 5分 (発表のみ、質疑はポスターセッションにて行って下さい)

8月3日(木)

13:00～13:10 開会の挨拶 脇田久伸  
13:10～14:25 <座長： 河合 潤>

### \*特別講演1

宇田応之 (早大理工) 特性X線、オージェ電子スペクトル解析へのDV-X $\alpha$ 法の利用と問題点

### \*招待講演1

松永克志 (京大工) イオン結晶中の格子欠陥の電子論的研究

14:25～14:45 コーヒーブレイク  
14:45～15:20 <座長： 田中 功>

1. 松尾修司 (福岡大理) 分子パッキング構造を形成する平面性窒素四配位ニッケル(II)錯体のXANESスペクトル解析
  2. 山本知之 (早大理工) 価電子帯がらみのオージェ電子スペクトルの解析
  3. 鈴木達彦 (早大理工) 硫黄化合物の価電子帯XPSスペクトルの解析
  4. 高橋昌男 (阪大産研) X線分析とMO計算によるTin-AIN固溶体薄膜の腐食挙動の研究
  5. 足立裕彦 (京大工) 光電子スペクトルの第一原理計算
  6. 中島崇之 (京大工) TiO<sub>2</sub>及びSrTiO<sub>3</sub>の電子線エネルギー損失分光微細構造(ELNES)
  7. 吉矢真人 (京大工)  $\alpha$ -quartzのX線吸収スペクトルの理論計算
- 15:20～15:55 <座長： 坂根弦太>
8. 繆 強 (京大工) 計算によるMoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>と[(NC)CuS<sub>2</sub>MoS<sub>2</sub>]<sup>2-</sup>クラスターの可視紫外吸収スペクトル
  9. 向山 毅 (京大化研) 3d遷移金属化合物のK $\alpha$ /K $\beta$ X線強度比はなにでできるか
  10. 中松博英 (京大化研) XANESと原子間距離 4f軌道の特徴
  11. 宋 斌 (電通大工) SO<sub>2</sub>のX線放出スペクトルの計算
  12. 繁實章夫 (京大理) ニッケル(II)シッフ塩基錯体の結晶構造とモデル計算

13. 鈴木知史 (京大理) 金属銅のX線吸収スペクトル
14. 兼吉高宏 (兵庫県立工技セ) DV-X $\alpha$ 法による窒化ホウ素X線放射スペクトルの検討  
15:55～16:30 <座長： 松永克志>
15. 小和田善之 (兵教大) DV-X $\alpha$ クラスター法によるテルライトガラスの構造解析
16. 池田隆司 (東工大理) Ag3dXPSの非対称性の評価、BaF<sub>2</sub>の電子状態
17. 那須三郎 (阪大基礎工) インビーム・メスバウアー分光とDV-X $\alpha$
18. 安井 潤 (東洋紡績) 2原子分子のX線スペクトル計算
19. 林 久史 (東北大科計研) 放射オージェスペクトル解析へのDV-X $\alpha$ 法の適用
20. 久保和造 (京大工) EELSの測定結果とDV-X $\alpha$ の比較
21. 山口敏夫 (福岡大理) 液体アンモニア中における溶媒和銅(II)イオンのXANESスペクトル解析  
16:30～18:00 ポスターセッション

8月4日(金)

9:00～9:10 事務連絡

9:10～10:25 <座長： 足立裕彦>

### \*特別講演2

朴 順子 (ソウル大) Electric-field induced stains and pyroelectric coefficients in PMN-PT solid solution

### \*招待講演2

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相互作用

10:25～10:45 コーヒーブレイク

10:45～11:20 <座長： 広津孝弘>

22. 水野正隆 (京大工) Fe<sub>3</sub>Cの電子状態に及ぼす固溶元素の影響
23. 高尾直樹 (京大工) 遷移金属ダイシリサイドの化学結合状態
24. 伊田英紀 (京大工) MgO中の遷移金属による光学遷移の理論計算
25. 姜 暎碩 (ソウル大) BaTiO<sub>3</sub>薄膜形成の電子状態
26. 西村 巧 (岡山大工) Ti/Mg二元系クラスターの固溶性とその電子状態
27. 小橋裕之 (岡山理大理) アセチレンを取り込んだ酸素・硫黄架橋モリブデンクラスター錯体の電子状態
28. 今中裕次郎 (岡山理大理) 硫黄架橋混合金属サンドイッチキュバン型クラスター錯体 [(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>Mo<sub>3</sub>S<sub>4</sub>MS<sub>4</sub>Mo<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>]<sup>8+</sup> (M=Mo, Sn, Sb, Hg)の電子状態

11:20~11:55 <座長： 三浦 薫>

29. 中嶋尚之 (早大理工) InSb(111)A-2x2 表面上における $\alpha$ -Sn安定成長のメカニズム  
30. 中村 淳 (早大理工) GsAs(111)極性界面の電子論的評価  
31. 丸山陸弘 (東工大理) M(bpy)<sub>2</sub>(CN)<sub>2</sub>(M=Fe, Ru, Os) 錯体の電子状態  
32. 金原康治 (東工大理) 遷移金属錯体の (d,d\*) 遷移状態  
33. 樋野村徹 (阪大基礎工)  $\alpha$ -Fe の磁気的性質  
34. 川崎晋司 (信州大繊維) C<sub>60</sub>F<sub>x</sub> の分子構造  
35. 関根理香 (東工大理) 遷移金属炭化物の化学結合の解明

11:55~13:25 ランチタイム  
13:25~14:25 ポスターセッション  
14:25~14:35 事務連絡

36. 森永正彦 (名古屋大工) 金属間化合物の結晶構造マップ  
37. 石井知彦 (東工大理) 平面分子Au<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub> の電子状態  
38. 森下政夫 (姫路工大) 鉄鋼スラグの電子状態  
39. 福島公親 (東芝研究開発セ) ステンレス鋼表面と不純物の相互作用  
40. 大橋直樹 (東工大工) DV-X $\alpha$ 法によるダイヤモンド中の欠陥の計算  
41. 横井泰治 (東京ガス基礎技研) プロブスカイト型酸化物触媒上でのNO吸着・活性化  
42. 中安哲夫 (宇部興産) Ln  $\alpha$ -sialon の電子状態

15:10~15:45 <座長： 山本一男>

43. 角田直人 (阪大工) Al 表面上のAu の電子状態  
44. 桑原浩史 (京大工) イオン結晶におけるイオン半径と圧縮性に対する電子論的考察  
45. 稲場秀明 (川崎製鉄) DV-X $\alpha$  計算によるパラメーターと熱力学パラメーターとの相関関係  
46. 神谷敏夫 (東工大工) DV-X $\alpha$  基底を用いた第一原理バンド計算による物性計算  
47. 藤間一美 (山梨大工) X $\alpha$ 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み  
~多中心積分の特徴とその実行~  
48. 岩沢美佐子 (ソニー中研) X $\alpha$ 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み VI.  
~モデル分子への適用と評価~  
49. 栗原正義 金属ウランの電子状態 (I)  
50. 尾上 順 (理 研) 結合距離の相対論的変化~Population解析からのアプローチ~

15:50~16:05 総 会  
16:05~16:30 写真撮影、コーヒープレイク  
16:30~18:00 ポスターセッション  
18:00~20:00 懇 親 会

8月5日(土)

9:00~9:10 事務連絡

9:10~10:40 <座長： 関根理香>

\*招待講演3  
三浦 薫 (ソニー中研) 強誘電性プロブスカイト型酸化物の電子状態

\*招待講演4  
田中 功 (京大工) セラミックス粒界研究への電子論の応用

\*招待講演5  
逸見義男 (神戸製鋼) BCC鉄中の水素の電子状態

10:40~10:50 コーヒープレイク

10:50~12:20 <座長： 尾上 順>

\*招待講演6  
山本一雄 (無機材研) 固体表面における低速H<sup>+</sup>イオンの中性化

\*招待講演7  
平田 勝 (日本原子力研) DV-X $\alpha$ 法を用いた溶媒抽出選択性の電子論的理解

\*招待講演8  
坂根弦太 (岡山理大理) DV-X $\alpha$ 法による硫黄架橋モリブデンクラスター錯体の特異性の考察

12:20~12:30 会議のまとめ、その他

DV-X $\alpha$ 研究協会会報, Vol. 8, No. 1 (1995)

---

1995年11月1日 発行

編集者 DV-X $\alpha$ 研究協会

発行人 DV-X $\alpha$ 研究協会

発行所 DV-X $\alpha$ 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気付

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 $\alpha$

Vol. 8, No. 1 (1995)

©The Society for Discrete Variational X $\alpha$ , Kyoto, 1995

