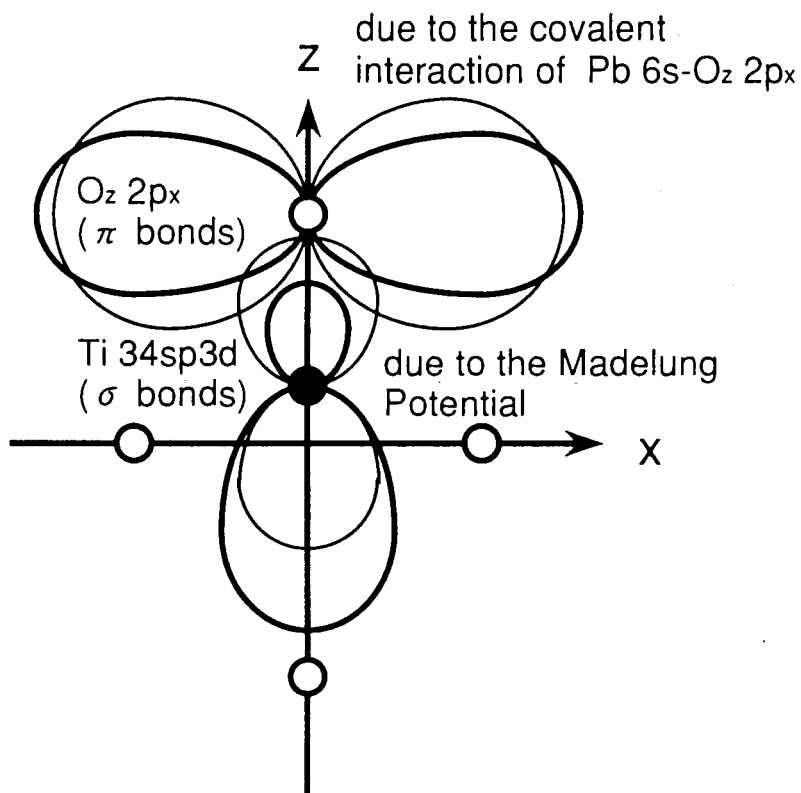


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

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

Vol.10, No.1 (1997)

Illustration of the origins of ferroelectricity



DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$
Vol. 10, No. 1 (1997)

—目次—

- 1997年度DV- $X\alpha$ 研究協会総会
 - 1996年度DV- $X\alpha$ 研究協会収支決算報告書会計報告
 - 1997DV- $X\alpha$ 研究協会予算案
 - 各部会の報告
 - 分光研究部会(1997年8月)
 - 材料研究部会(1997年8月)
 - 第14回相対論効果研究部会(1996年12月)
 - 第15回相対論効果研究部会(1997年3月)
 - 第16回相対論効果研究部会(1997年6月)
 - 第17回相対論効果研究部会(1997年8月)
 - お知らせ(Symorbのバージョンアップについて)
 - DV- $X\alpha$ 研究協会事務局より
-
- 第10回DV- $X\alpha$ 研究会 要旨集

第10回 DV-X α 研究会 プログラム

会期： 1997年 8月6日(水) ~ 10日(金)

会場： KKR 名古屋三の丸会館

〒460 名古屋市中区三の丸一丁目5-1

電話 052-201-3326

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 60分 (講演50分+質疑応答10分)

招待講演 25分 (講演20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またはコメント時間に行ってください)

コメント 15分 (講演のまとめと質疑)

< 8月6日(水) >

10:00~10:10 開会の挨拶 森永正彦

10:10~10:55 <座長： 岡村一宏>

- A1 三浦 薫 (ソニー中研) PbTiO₃の電子状態
A2 神田英之 (京大工) NiOの酸素K殻ELNESの理論計算
A3 齊藤朋広 (早大理工) Al/Si界面のXPSスペクトルの解析
A4 中村彰男 (早大理工) Ag表面の電子状態解析
A5 金 駿洙 (韓国科学技術院) Simulation of e-beam lithography process as a
(キム ギース) molecular level

コメント

10:55~11:35 <座長： 福島公親>

- A6 大場史康 (京大工) ZnO中の遷移金属不純物の電子状態
A7 金 洋洙 (京大工) チタン dichalcogenidesの電子状態
(キム ヤンス)
A8 橋村一誠 (京大工) SiO₂ガラス中における遷移金属イオンの電子状態
A9 松本修治 (岡山大環境理工) 酸化物ガラスの電子構造シミュレーション
A10 中城伸介 (京大工) MgO/金属界面の化学結合状態

コメント

11:35~12:50 ランチタイム

12:50~14:50 <座長： 杉原 淳>

☆特別講演 60分

A11 朴 順子 (ソウル大) Incorporation Phenomena of Donor Dopant in BaTiO₃
(パク ソオンジャ) system

☆特別講演 60分

A12 金 明喆 (郡山大) ラマン分光による Pb(Sc_{1/2}Ta_{1/2})O₃ の秩序-無秩序
(キム ミュンチュル) 現状研究

14:50~15:20 コーヒーブレイク

15:20~16:00 <座長： 森下政夫>

A13 藤居俊介 (京大工) 遷移金属シリサイドの化学結合状態
A14 川崎晋司 (信州大繊維) ThCr₂Si₂ 型構造をもつ KM₂S₂(M:Co,Ni,Cu)の電子構造
A15 水野正隆 (神戸製鋼材料研) In₂O₃ の電子状態
A16 西田和史 (岡山大環境理工) ホウ酸塩ガラスの電子状態
コメント

16:00~16:45 <座長： 三浦 薫>

A17 福島公親 (東芝研究開発 センター) セラミックス中不純物の電子状態解析
A18 米倉伊佐久 (湘南工大工) DV-X α 法による BaTiO₃ と金属電極の濡れ性
A19 藤田昌樹 (湘南工大工) (Pb,Ca)ZrO₃ の DV-X α 法による電子構造
A20 岡村一広 (松下電池技術研) リチウム二次電池用正極活性物質
LiNi_{1-x}M_xO₂(M=Ni,Co,Cr,Fe,Mn,Al)の電子状態と電極特性
A21 石井知彦 (いわき明星大) CoSb₃ の電子状態
A22 足立和義 (静岡大理) CaB₆、YB₆ の電子状態
A23 関根理香 (静岡大理) スモールメタルクラスターの形を決めるのは何か
コメント

17:00~21:00 運営委員会、常任幹事会

17:00~21:00 ポスター

< 8月7日 (木) >

#ポスターは終日

9:00~9:05 事務連絡

9:05~10:05 <座長: 大野かおる>

☆特別講演 60分

B1 Arne Rosen (Chalmers Univ.) Clusters, Fullerenes and Nanotubes-New Promising Species in Materials Science

10:05~11:15 <座長: 関根理香>

B2 蔭 鍾涛 (静岡大電子工研) Application of DV-X α to the Al₂O₃-Cr₂O₃ mask
(チアン ツオン-タオ) materials for deep-UV lithography

B3 申 ウソク (名古屋大工) 多孔質 SiC の電子構造 II

☆招待講演 25分

B4 尾上 順 (理研) 軌道解析からみた重原子を含む系の非相対論効果

☆招待講演 25分

B5 Turgut Bastug (京大化研) Density Functional calculation of the diatomic molecules

11:15~12:40 ランチタイム

12:40~13:40 <座長: 中松博英>

☆招待講演 25分

C1 宇田 応之 (早稲田大理工) ROR 過程による O KVV Auger スペクトルの形状変化

B6.1 小野 倫也 (大阪大工) 実空間差分法を用いた二原子分子の電子状態計算

B6.2 杉本 光宏 (大阪大工) EEM 加工機構の第一原理分子動力学シミュレーション

(B6 Don Ellis は講演中止になりました)

13:40~14:40 <座長: 尾上 順>

☆特別講演 60分

B7 大野かおる (東北大金研) 全電子混合基底法を用いた電子状態計算 (Electronic-states calculations with an All-electron Mixed-basis Approach)

14:40~14:50 写真撮影

14:50~15:10 コーヒーブレイク

15:10~16:00 <座長： 小和田善之>

☆招待講演 25分

B8 中安哲夫 (宇部興産 DV-X α 分子軌道法の拡張—高精度化へ向けて—
宇部研究所)

☆招待講演 25分

B9 中松博英 (京大化研) 題名未定

16:00~17:00

☆特別企画 ソフト開発の現状と動向についてのディスカッション

17:00~20:00 懇親会

< 8月8日(金) >

9:00~9:05 事務連絡

9:05~9:45 <座長： 安井 潤>

- C2 山本知之 (早稲田大理工) Al, Al₂O₃, Si, SiO₂のKLV Auger スペクトルのプロファイル計算
- C3 菅野博義 (早稲田大理工) O K α 蛍光X線スペクトルの解析
- C4 金井敦志 (早稲田大理工) O K X線吸収スペクトルの解析1
- C5 大沢仁志 (早稲田大理工) O K X線吸収スペクトルの解析2
- C6 館林 徹 (早稲田大理工) S L_{2,3} X線吸収スペクトルの解析

9:45~10:45 <座長： 山本知之>

☆招待講演 25分

- C7 小笠原一禎 (京大工) DV-X α 法を用いた多重項エネルギーの第一原理計算
- C8 伊藤伸一 (鹿児島大工) ホタルルシフェリンの半経験的分子軌道計算
- C9 兼良高宏 (兵庫県立工業 有機シリコン化合物のX線スペクトル計算
技術センター)
- C10 金 秀珍 (京大工) 炭素化合物の発光X線スペクトルの角度異方性の DV-X
(キム スジン) α 計算
- C11 高橋昌男 (大阪大産研) ステアリン酸亜鉛単分子膜の Zn K-XANES

10:55~11:55 <座長： 坂根弦太>

☆招待講演 25分

C12 小和田善之 (兵庫教育大) 固体電解質中の伝導イオン周辺の電子状態

C13 森下政夫 (姫路工大工) $\text{SiO}_2\text{-Na}_2\text{O}$ 系製鋼スラグの Si K β EPMA スペクトルの検討
の結果に基づく塩基度の解釈

C14 坂根弦太 (岡山理大理) 硫黄架橋モリブデンクラスター錯体の電子状態

C15 横溝臣智 (福岡大理) Ni(II)錯体液晶 Ni-K XANES スペクトル解析

C16 平田 勝 (原研東海研究所) アクチノイド硝酸系の電子状態

11:55~13:10 ランチタイム

13:10~14:05 <座長： 高橋昌男>

☆招待講演 25分

C17 湯川 宏 (名大工) 水素吸蔵合金の化学結合状態

C18 原田祥久 (名大工) 金属間化合物の結晶構造マップ

C18 杉原 淳 (湘南大工) Ag ドープによる Bi_2Te_3 の電子構造と物性

C20 栗原正義 (日環協) 金属ウランの電子構造 (2)

14:10~15:00 総会、事務連絡

DV- $X\alpha$ 研究協会会報, Vol.10, No.1 (1997)

1997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
〒532 大阪市淀川区西中島5丁目6-16
新大阪大日ビル10階 1001号
泉科学技術振興財団気付
DV- $X\alpha$ 研究協会事務局
振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会
印刷所 研恒社

Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$
Vol. 10, No.1 (1997)

©The Society for Discrete Variational $X\alpha$, Osaka, 1997

D X_α