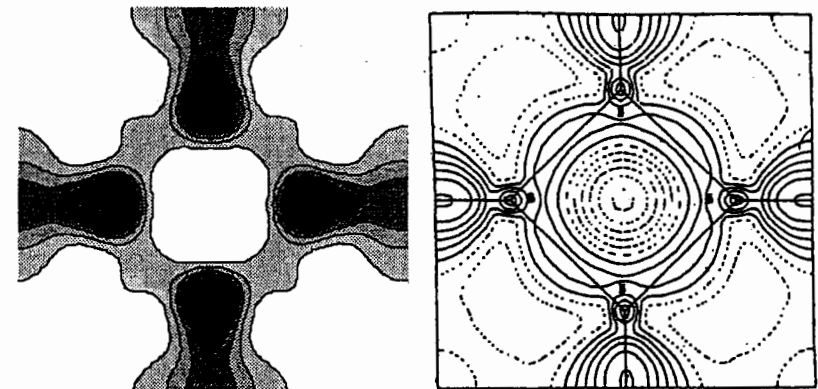


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

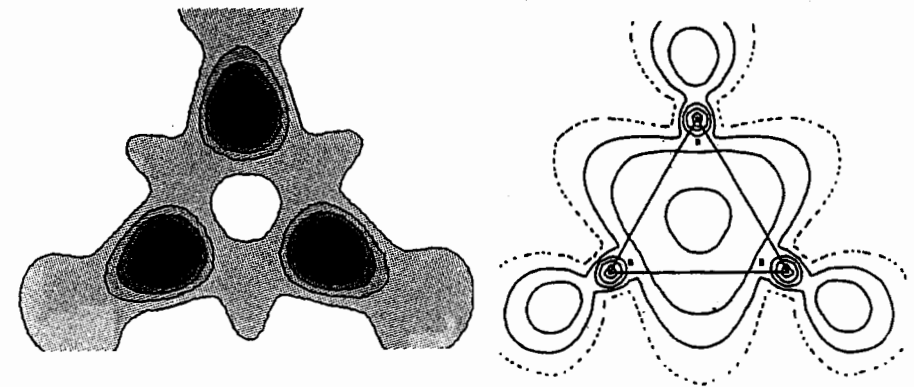
Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol.10, No.2 (1997)

Difference of charge density distribution for CaB_6



B4 square face



B3 triangular face

D $X\alpha$

編集 DV- $X\alpha$ 研究協会

金属材料の量子化学と量子合金設計

足立裕彦・森永正彦・那須三郎 共著

B5・200頁・本体4,000円

従来は有機化合物の電子状態計算に応用されてきた分子起動法を、金属材料の問題に応用しその成果を紹介したもので、DV-X α クラスター法を、金属材料をはじめとする材料研究の新しい研究手法として提案しようとするのもである。金属学や材料工学の研究者・技術者のみならず、新しい材料科学を目指す大学院生・学生向き。

量子材料科学入門

—DV-X α 法からのアプローチ

足立裕彦 著

A5・316頁・本体4,272円

量子化学的手法を様々な材料科学の分野に利用する必要性が年々高まっている。本書は分子起動法で計算された色々な物質の電子状態を解説したものであるが、計算方法は著者らが開発・改良を加えたDV-X α 法を使っている。著者のこれまで蓄積してきた多くの成果を盛り込み、今後、原子物理、物性物理、金属・セラミック材料学、錯体化学、触媒化学、分光化学など様々な分野への利用が期待され、その好指針書となった。

DV-X α 法による電子状態計算

—そのプログラムと解説

岩沢美佐子・足立裕彦 共著

この解説書はDV-X α 法による分子軌道計算のプログラム“DVSCAT”の内容を解説し、計算方法などを詳しく説明したものである。実際の計算がどのように行なわれるのかを理解するのに大変役に立ち、さらにプログラムを改良したり、新しいプログラムを開発しようとする場合にもきわめて有用である。

価格は税別

TEL03-3264-5711 FAX03-3265-5149

三共出版

〒101-0051 千代田区神田神保町3-2

DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

Vol. 10, No. 2 (1997)

—目次—

- 1997年度DV-X α 研究協会役員名簿
- DV-X α 研究協会会則
- 学生会員の方へお願い
- DV-X α 研究協会会員募集と入会申込書
- たぬき部会企画の講演会のお知らせ
- DV-X α 研究協会賛助会員の募集
- 韓日DV-X α のシンポジウム(第11回DV-X α 研究会)のお知らせ
- DV-X α 研究協会事務局より

■第10回DV-X α 研究会

- ・ 要旨集(B1~C20)
- ・ 企画「DV-X α 法の将来についてのディスカッション」

高精度全エネルギー解析のためのGQ(Gaussian Quadrature)-X α 法

高精度化について

パソコン版DV-X α 法の主な改良点

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下さい)

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 斉藤朋広 (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 騏洙 (韓国科学技術院) Simulation of e-beam lithography process as a molecular level
 (キム ギース)

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 system
 (パク ソオンジャ)

☆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 宇部研究所) DV-X α 分子軌道法の拡張-高精度化へ向けて-

☆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 (兵庫県立工業技術センター) 有機シリコン化合物のX線スペクトル計算

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 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) $\text{SiO}_2\text{-Na}_2\text{O}$ 系製鋼スラグの Si K β EPMA スペクトルの検討とそ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

<B1> Clusters, fullerenes and nanotubes - new promising species in materials science

(Department of Physics, Göteborg University and Chalmers
University of Technology, S-412 96 Göteborg, Sweden)

Arne Rosén, Daniel Östling and Henrik Grönbeck

Access to techniques to produce and characterize free and deposited clusters, fullerenes and nanotubes has during the last decades generated several exciting discoveries. This contribution will give some results from recent electronic structure calculations of small transition metal clusters, C_{60} and nanotubes evaluated within the Local-Density-Functional Method. The calculations have been done using an LCAO approach except for the nanotubes and nanowires which have been treated with a new numerical method treating up to ten thousand electrons self-consistently. The effect of gradient corrections have also been analyzed for the transition metal clusters.

The optical properties of C_{60} and metal covered C_{60} have also been analyzed using a simplified RPA approach.

参考文献

以下に、他の国際会議の proceedings を抜粋したものを添付します。
特に、Advances in Quantum Chemistry (第1回 DV- $X\alpha$ ワークショップの proceedings) に詳しい論文が掲載予定です。

- Ref. 1) Adv. in Quantum Chemistry, in press.
Ref. 2) Chem. Phys. Lett., 256 (1996) 109-118.
Ref. 3) Z. Phys. D 40. (1997) 206-209.
Ref. 4) Chem. Phys. Lett., in press.
Ref. 5) J. Chem. Phys., December, (1997).

Ref. 1)

Twenty to thirty years of DV- $X\alpha$ calculations: A survey
of accuracy and applications

Arne Rosén

DV- X_α 研究協会会報, Vol. 10, No. 2 (1997)

1997年12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

〒573 大阪市淀川区西中島5丁目6番16号

新大阪大日ビル10階1001号

泉科学技術振興財団寄付

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_α

Vol. 10, No. 2 (1997)

© The Society for Discrete Variational X_α , Osaka, 1997