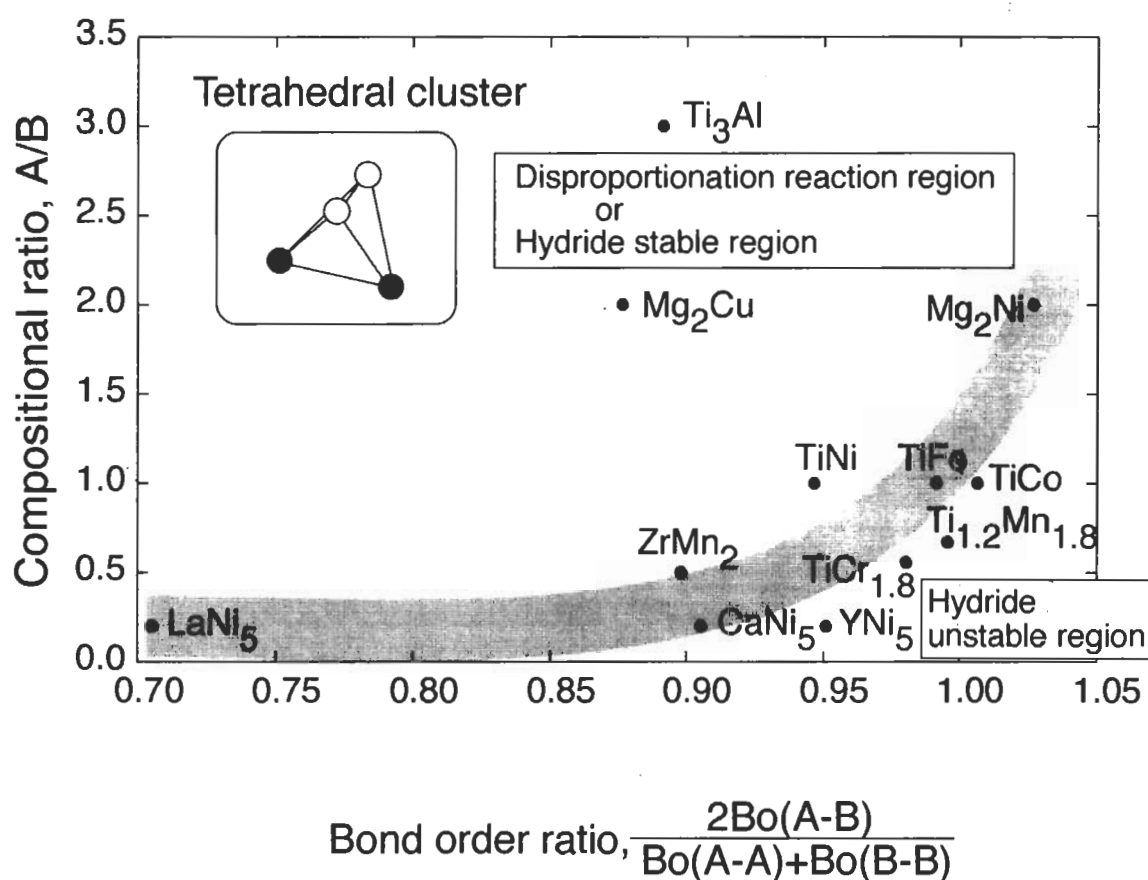


DV- $X\alpha$ 研究協會會報

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

Vol. 12, No. 1 (1999)



DV- $X\alpha$ 研究協会会報

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

Vol. 12, No. 1 (1999)

目次

第5回 DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞 岡村一広氏 松永克志氏 湯川 宏氏	2
第12回 DV- $X\alpha$ 研究会報告書	
・ ・ ・ はじめに	11
・ ・ ・ 集合写真	12
・ ・ ・ 参加者名簿	13
・ ・ ・ スナップ写真集	16
・ ・ ・ プログラム	18
・ ・ ・ 講演番号 Index	21
・ ・ ・ 研究会報告書 A1~B5	22
(B6 以後は No.2 に掲載予定です)	
第6回 DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞受賞候補者の募集	132

編集 DV- $X\alpha$ 研究協会

第12回DV-X α 研究会 プログラム

会期：1999年 8月4日(水) ~ 6日(金)

会場：岡山大学大学院自然科学研究科

〒700-8530 岡山市津島中三丁目1番1号

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 30分(講演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および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4日(水)>

13:00~13:10 開会の挨拶

三浦嘉也

13:10~13:55

- | | |
|------------------|---|
| A1 巽一徹 (京大工) | 遷移金属中ボロン(B)によるK殻ELNES理論計算 |
| A2 村松康司 (NTT生環研) | 水素化フラーレンの分子・電子構造と高分解能X線スペクトル |
| A3 林健一 (早大理工) | Calculation of Near Edge Structures for MgF ₂ and ZnF ₂ |
| A4 世木隆 (甲南大理) | TiS ₂ に対するLi・Feインターカレーション |
| A5 那須三郎 (阪大工) | Au-197メスbauer分光におけるアイソマー・シフトについて |
| A6 岩田貴普 (京大工) | 6配位のTi ⁴⁺ イオンによるL _{2,3} edge ELNESの理論計算 |

コメント

13:55~14:25 コーヒーブレイク

14:25~15:10

- | | |
|--------------------------|---|
| A7 平田勝 (原研東海研) | 相対論密度汎関数法によるAm, Eu水和錯体の電子状態 |
| A8 Turgut Bastug (原研東海研) | Electronic and geometric structure calculation of super-heavy elements. |
| A9 湯川宏 (名大工) | 水素吸蔵合金の構成元素の役割と合金設計 |
| A10 伊藤由起子 (京大工) | 遷移金属の溶解熱の計算 |
| A11 加藤政彦 (名大工) | DV-X α 法による低速イオンの電子的阻止能の計算 |
| A12 谷篤史 (阪大理) | DV-X α 法によるステーションバイト中の格子欠陥の分子軌道とESRパラメータ計算 |

コメント

15:10~15:55

- | | |
|-------------------|--|
| A13 上野祐子 (NTT生環研) | 活性炭に吸着したベンゼンの化学状態計算 |
| A14 近藤龍一 (静大理) | 3d前期遷移金属クラスターの構造 |
| A15 藤原康裕 (慶大理工) | カルシウムシリケート前駆体生成におけるメカノケミカル反応課程の解析 |
| A16 劉軼 (名大VBL) | 2次電池用スピネル型マンガン酸リチウムの電子状態 |
| A17 木山明 (京大工) | リチウム電池電極としてのLiMn ₂ O ₄ の電子構造 |
| A18 石井知彦 (都立大理) | 擬一次元ハルデンギャップ系錯体の構造と電子状態 |

A19 寺師大輔 (早大理工) Resonant Orbital Rearrangement during 1s Ionization of O in MgO
コメント

15:55 ~ 17:25 ポスターセッション
運営委員会・幹事会

< 8月5日 (木) >

9:00 ~ 9:10 事務連絡

9:10 ~ 10:10

B1 特別講演 60分

Soon Ja Park

韓国セラミックス工業の現況

10:10 ~ 11:00

- B2 Hwasoo Park (Kookmin Univ.) The Application of SCF-X α Scattered Wave Cluster Method to ZnS
B3 吉野正人 (名大工) ペロブスカイト型酸化物 SrRuO₃ の電子状態と構造相転移の機構
B4 萩原 達也 (岡大自然) アルカリ珪酸塩ガラスの電子状態
B5 森分 博紀 (京大工) スピネル型結晶構造酸化物 MgM₂O₄ (M=Al, Cr, Fe) 中の点欠陥周囲の化学結合状態
B6 藤田昌樹 (静大理工) ペロブスカイト型酸化物の誘電特性
B7 磯谷 成志 (京大工) ZnO 中の点欠陥の電子状態
B8 金 洋洙 (四工技研) スピネルマンガン酸化物の電子状態
コメント

11:00 ~ 11:30

B9 招待講演 30分

福島 公親 (東芝 P S 社)

表面不純物の電子構造

11:30 ~ 12:15

- B10 荻生泰之 (早大理工) Calculation of Near Edge Structures for CaF₂ and SrF₂
B11 中川克己 (キヤノン) 対称軌道を用いた結合次数と分配エネルギーの計算
B12 中野 雅信 (京大工) 金属酸化物の酸素K励起端 E L N E S のピークシフト解析
B13 森下政夫 (姫工大工) SiO₂ - CaO スラッグの Si K β X線発光スペクトルの計算に CaO 濃度を取り入れる方法
B14 河合潤 (京大工) 遷移状態法における 2/3 空孔の効果について
B15 佐々 卓 (早大理工) Calculation of Near Edge Structure for h-BN
コメント

12:15 ~ 13:15 昼食

13:15 ~ 14:15 ポスターセッション

14:15 ~ 14:45

B16 招待講演 30分

小笠原 一禎 (京大工)

フルポテンシャル DV - X α 法による開殻系の電子状態計算

14:45 ~ 15:30

B17 山下 大輔 (早大理工)

Auger spectra for MgO, CaO and SrO

B18 李 江 (京大工)

MgO 中の Zn 不純物の化学結合状態

- B19 森居隆史 (岡大自然) 遷移金属シリサイドの軟X線放出スペクトルのDV-X α 法による解析
- B20 山口敏弘 (縮谷大理工) 鉄(III)及びマンガン(III)錯体のX線光電子スペクトルとそれらのDV-X α 分子軌道計算
- B21 山本昌輝 (京大工) MgO中のCr³⁺による光学スペクトルの第一原理計算
- B22 古賀顕司 (福岡大) 窒素含有金属錯体の構造とN-K XANES スペクトル
コメント

15:30 ~ 16:15

- B23 中松博英 (京大化研) 酸素酸塩のXANESにおける局所構造の情報
- B24 小和田善之 (兵庫教大) β -ジケトンにより化学修飾された金属アルコキシドの光感応性
- B25 尾上 順 (理研) 密度汎関数法を用いたC₆₀光重合反応の検討(その1)
- B26 原 寿樹 (理研) 密度汎関数法を用いたC₆₀光重合反応の検討(その2)
- B27 半田晃史 (早大理工) Ni/Si(111)-Hの電子構造
- B28 高橋昌男 (阪大産研) 亜鉛水溶液のZn K-XANES スペクトル-DV-X α 計算とFEFF7計算

16:15 ~ 17:45 ポスターセッション

18:00 ~ 懇親会

< 8月6日(金) >

9:00 ~ 9:10 事務連絡

9:10 ~ 10:10

C1 特別講演 60分

Myung Chul Chang (Kunsan Univ.) Electronic structure of the cation substituted BaTiO₃ using DV-X α calculation

10:10 ~ 10:40

C2 招待講演 30分

杉原淳 (湘南工大) 置換型ケイ化鉄の熱電特性とその電子構造

10:40 ~ 11:10

C3 招待講演 30分

山本知之 (理研) PC版DV-X α を用いた価電子帯オージェスペクトルの計算法

11:10 ~ 11:40

C4 招待講演

岡村一広 (松下電池工) リチウム電池電極活物質の電位推算方法
~配位子の電気陰性度と電極電位との相関~

11:40 ~ 12:10 総会・事務連絡・閉会の辞

第 12 回 DV-X α 研究会報告書

Reports of 12th DV-X α Annual Meeting

Index

A1 . . .	22	A13 . . .	76
A2 . . .	27	A14 . . .	80
A3 . . .	31	A15 . . .	85
A4 . . .	34	A16 . . .	90
A5 . . .	39	A17 . . .	95
A6 . . .	43	A18 . . .	99
A7 . . .	48	A19 . . .	104
A8 . . .	52	B1	108
A9 . . .	56	B2	113
A10 . . .	61	B3	118
A11 . . .	66	B4	123
A12 . . .	71	B5	128

※B6 以後の報告書は No.2 に掲載されます。

DV- X_α 研究協会会報, Vol. 12, No. 1 (1999)

1999年12月20日 発行

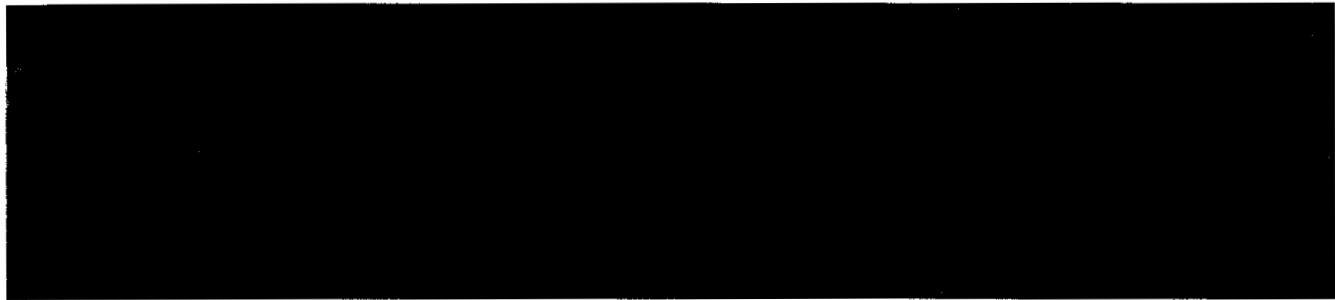
編集者 DV- X_α 研究協会
発行人 DV- X_α 研究協会
発行所 DV- X_α 研究協会

〒531-0072 大阪市北区豊崎3丁目9番7号 いずみビル
(財) 泉科学技術振興財団気付

振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会

印刷所 黒船印刷株式会社
〒422-8033 静岡市登呂二丁目4番25号
電話 054-386-0236

Bulletin of the Society for Discrete Variational X_α
Vol. 12, No. 1 (1999)
©The Society for Discrete Variational X_α , Osaka, 1999



DVX α