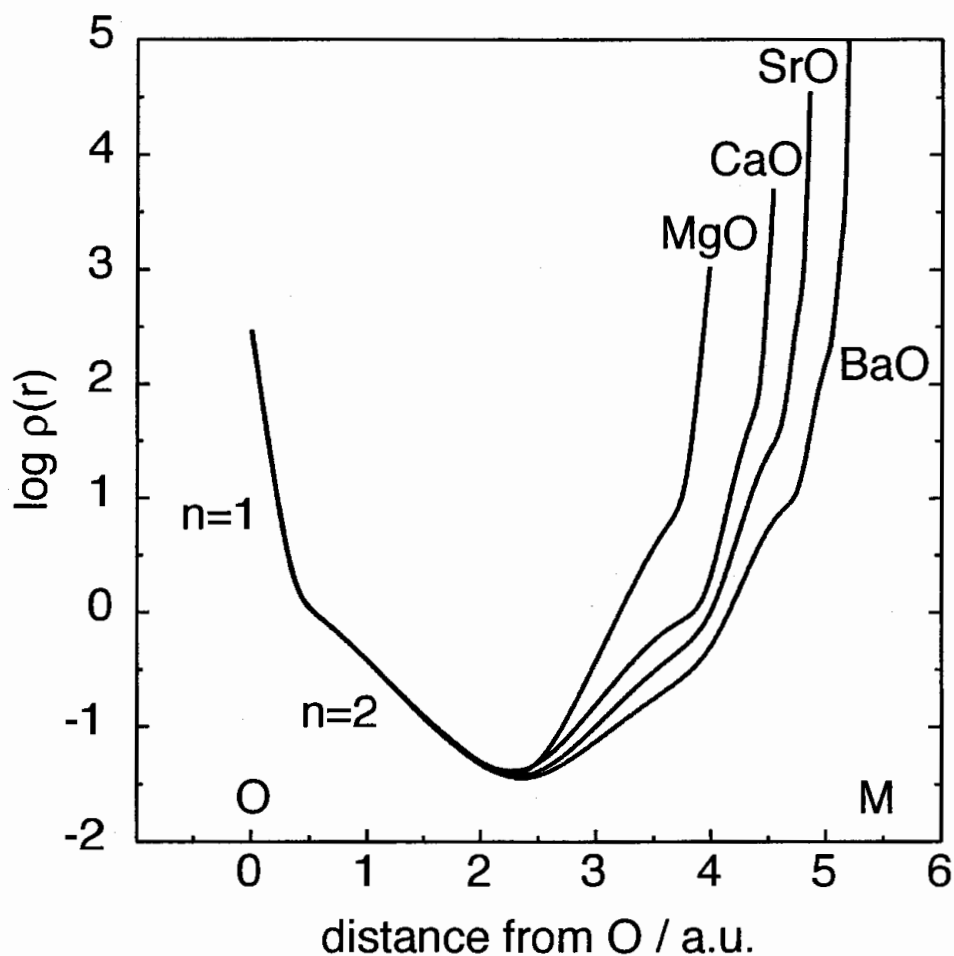


# DV- $X\alpha$ 研究協會會報

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

Vol.15, No.1 (2002)



Logarithm of the electron density on the line linking the two nuclei, O and M, in NaCl-type oxides.

# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

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

Vol. 15, No. 1 (2002)

## 目次

2002 年度 学術賞および奨励賞	1
・ ・ ・ DV-X $\alpha$ 研究協会各賞選考について 森永正彦	1
・ ・ ・ 第 2 回 DV-X $\alpha$ 研究協会学術賞 向山 毅	2
・ ・ ・ 第 8 回 DV-X $\alpha$ 研究協会奨励賞 大場史康	5
第 15 回 DV-X $\alpha$ 研究会報告書	
・ ・ ・ 集合写真	8
・ ・ ・ はじめに	9
・ ・ ・ プログラム	10
・ ・ ・ 参加者名簿	12
・ ・ ・ 講演番号 Index	15
・ ・ ・ 研究会報告書 A-1~A-13、B-1~B-12	17
	(B-13 以後は No.2 に掲載予定です)
・ ・ ・ 解説記事 DV-X $\alpha$ 法による材料設計 -水素と材料-	17
	<第 1 回学術賞> 森永正彦
編集後記	118

編集 DV-X $\alpha$  研究協会

## 第15回DV-X $\alpha$ 研究会プログラム

基調講演 45分(発表30分, 質疑応答15分)

招待講演 30分(発表20分, 質疑応答10分)

一般講演 8分(発表6分, 質疑応答2分)

1日目 7月31日(水)

13:00~ 開会の挨拶(足立裕彦 会長)

13:10~13:55 基調講演 <座長 関根理香>

A1 森永正彦(名大工) DV-X $\alpha$ 法による材料設計 -水素と材料-

13:55~14:27 一般講演 <座長 関根理香>

A2 石井知彦(香川大工) 金属ポルフィリンの電子状態

A3 田中恵一(関学理工) ULSI電極材料シリサイドの電気伝導

A4 高原 渉(阪大工) 物質内情報伝達媒体としてのDV-X $\alpha$ 分子軌道

A6 吉野正人(名大工) 化合物中の原子の周りの電子密度分布と化学結合

14:27~14:50 休憩

14:50~15:38 一般講演 <座長 石井知彦>

A8 小和田善之(兵教大) 化学修飾されたTiアルコキシドの電子状態と光吸収

A9 近藤和志(香川大工) 有機磁性体の強磁性・反強磁性的相互作用の解明

A10 関根理香(静大理) 密度汎関数法によるTcクラスターの構造と電子状態

A11 立石雄一(福岡大理) DV-X $\alpha$ 法を用いた溶液中におけるAl-EDTA錯体の構造解析

A12 坂根弦太(岡山理大理) 8-ヒドロキシキノリンを配位子とするモリブデンクラスター錯体の電子状態

A13 尾上 順(東工大原研) 光・電子線重合フラーレンポリマーの電気特性に関するDFT研究

15:38~17:30 コーヒー・ブレイク~ポスターセッション

17:00~ 運営委員会・幹事会

2日目 8月1日(木)

9:00~9:10 事務連絡

9:10~9:40 招待講演 <座長 山本知之>

B1 村松康司(原研関西研) 軽元素材料の軟X線スペクトル解析; 六方晶窒化ホウ素と直線状多環芳香族炭化水素

9:40~10:20 一般講演 <座長 山本知之>

B2 藤原 学(龍谷大理工) 同一配位子を有する第一遷移金属錯体のX線光電子スペクトルとDV-X $\alpha$ 分子軌道計算

B3 武田照美(龍谷大理工) 環状テトラアザ配位子を有するニッケル(II)錯体のX線光電子スペクトルとDV-X $\alpha$ 分子軌道計算

B4 鶴目宜孝(龍谷大理工) 種々の配位構造を有する銅(II)錯体のX線光電子スペクトルとDV-X $\alpha$ 分子軌道計算

B5 中島嘉之(理研計器) 液体光電子分光の試み

B6 山重寿夫(福岡大理) 軟X線吸収スペクトルとDV-X $\alpha$ 分子軌道計算による金属ポルフィリン錯体の状態分析

10:20~10:50 コーヒー・ブレイク

10:50~11:38 一般講演 <座長 村松康司>

B7 越野雅至(京大化研) TCNQおよびフッ素化TCNQのEELS解析とDV-X $\alpha$ 計算

B8 藏本健太郎(姫工大) 高分子のX線スペクトル解析におけるクラスターモデルの検討

B9 山本知之(理研) BP, GaP, InPのPLX線発光スペクトルの解析

B11 宮前 亨(京大工) 3d遷移金属酸化物におけるL<sub>2,3</sub>-edge XANES/ELNESの第一原理計算による解析

B12 池野豪一(京大工) NiOにおけるNi L<sub>2,3</sub>-edge XANESの第一原理計算

11:30~13:00 昼食

13:00~13:30 招待講演 <座長 尾上 順>

B13 中川克己 (キャノン) DV-X  $\alpha$ 法による分子の全エネルギー計算

13:30~14:02 一般講演 <座長 尾上 順>

B14 小笠原一禎 (関学理工) 対称性を考慮した相対論DV-ME法の開発

B15 安井 潤 (東洋紡総研) クラスタ-モデルにおける電子有効質量の評価方法

B16 水野正隆 (阪大工) LaNi<sub>5</sub>-H系合金に関する陽電子寿命値の理論計算

B17 杉田一樹 (阪大工) 金属酸化物の陽電子寿命計算

14:02~14:30 コーヒー・ブレイク

14:30~15:42 一般講演 <座長 小笠原一禎>

B18 山本昌弘 (湘南工大工) ウルツ鉱構造上の金属の界面における電子構造

B19 磯邊孝昌 (湘南工大工) チタニア A-サイト置換における電子構造

B20 田中久美子 (静大理) 酸化物表面の電子状態と吸着エネルギーの検討

B21 大橋直樹 (物材研) 酸化亜鉛表面の原子配列に関する検討

B22 松井雅史 (京大工) 酸化物中の多価元素添加による局所環境変化

B23 跡路栄作 (関学理工) 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (3)

B24 大浜康彦 (関学理工) 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (4)

B25 川口真寛 (関学理工) 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (5)

B26 江刺 昇 (関学理工) 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (6)

15:42~17:30 写真撮影~ポスターセッション

18:00~ 懇親会

3日目 8月 2日 (金)

9:00~9:10 事務連絡

9:10~9:55 基調講演 <座長 小和田善之>

C1 平田 勝 (原研) 計算化学的手法を用いた抽出剤開発

9:45~ 9:55 休憩

9:55~10:59 一般講演 <座長 小和田善之>

C2 福島公親 (東芝) 金属酸化物の解析及び反強磁性発現機構の検討

C3 世木 隆 (阪大基礎工) 遷移金属酸化物 MO<sub>6</sub> クラスタの分子軌道計算

C4 茂木昌都 (日産アーク) Sr<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>TiO<sub>3</sub>の電子状態計算

C5 山下和芳 (関学理工) In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>へのドーピング効果とその電子状態

C6 国須正洋 (京大工) 添加物を用いた ZnO 高压相の合成

C7 高橋靖彦 (学振) NaCoO<sub>2</sub>の電子構造

C8 桑原彰秀 (東大工)  $\alpha$ -ZrO<sub>2</sub>における酸素イオン拡散と電子構造

A7 間野晶子 (岡山大自然) アルカリホウ酸塩結晶の配位環境と電子状態

10:59~11:30 ポスターセッション

11:30~ 総会・事務連絡・閉会の挨拶

# 第 15 回 DV-X $\alpha$ 研究会報告書

## Reports of 15th DV-X $\alpha$ Annual Meeting

### 目次

番号	頁	講演者氏名						
A1	17	森永正彦	A10	57	関根理香	B5	91	中島嘉之
A2	25	石井知彦	A11	62	立石雄一	B6	95	山重寿夫
A3	30	田中恵一	A12	64	坂根弦太	B7	98	越野雅至
A4	35	高原 渉	A13	67	尾上 順	B8	102	蔵本健太郎
A6	40	吉野正人	B1	71	村松康司	B9	106	山本知之
A7	43	間野晶子	B2	76	藤原 学	B11	109	宮前 亨
A8	47	小和田善之	B3	81	武田照美	B12	113	池野豪一
A9	52	近藤和志	B4	86	鶴目宜孝			

※第一著者（講演者）の名前のみしめしました。

※ B13~26, C1~8 の講演番号の報告書は No.2 に掲載予定です。

<編集後記>

今号の表紙は名古屋大学大学院工学研究科の吉田正人氏にお願いしました。  
会報についてのご意見は遠慮なく下記へお寄せください。

静岡大学 理学部化学科 関根理香  
電子メール [scrseki@ipc.shizuoka.ac.jp](mailto:scrseki@ipc.shizuoka.ac.jp)

DV-X $\alpha$ 研究協会会報, Vol. 15, No. 1 (2002)

---

2002年 12月 20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  
〒531-0072 大阪市北区豊崎3-10-2 I & F 梅田1004  
(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 $\alpha$   
Vol. 15, No. 1 (2002)  
©The Society for Discrete Variational X $\alpha$ , Osaka, 2002  
ISSN 1346-5015



**DVX $\alpha$**

