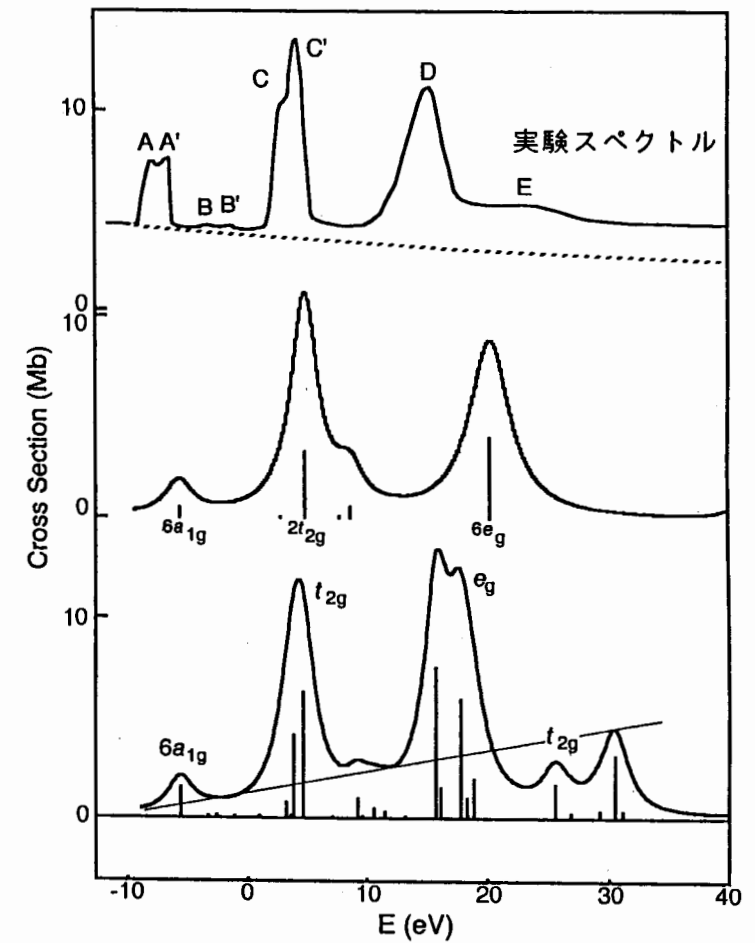


1990年度 DV-X α 研究会



SF₆ 硫黄 L X線吸収スペクトル

第3回 DV-X α 研究会
1990

平成2年 8月8日(水)~9日(木)

神戸市 舞子ビラ

DVX α

住友金属工業株式会社

(株)富士通研究所

日本電気株式会社

新日本製鉄株式会社

花王株式会社

(株)村田製作所

京セラ株式会社

T D K 株式会社

(株)日立製作所

最後に、研究会と懇親会の計画と準備、研究会当日の進行及びこの報告書の作製等に多大の尽力をつくされた京都大学化学研究所中松博英氏に深く感謝します。

1990年度DV-X α 研究会担当世話人

京都大学化学研究所 向山 毅

第3回 DV-X α 研究会 プログラム

会期： 1990年8月8日(水)～9日(木)

場所： 舞子ビラ 大歳の間(新館1階)

ポスター会場： 摩耶の間(新館1階)

登壇者のみ記載(共同研究者は、本文をご覧ください)

講演時間 討論時間 (表示のないのは、5分+5分)
分 分

8月8日(水)

1:00-2:30

(座長 森永正彦)

向山 毅

あいさつ、その他

- 1 齊藤淳一 20 10 金属間化合物TiAlの変形過程における電子状態
2 森下政夫 20 10 水溶液腐食におけるTi合金のカソードの電子状態
3 芹沢千絵 10 5 α -Snと β -Snの電子構造の比較

2:30-2:50

休憩

2:50-4:10

(座長 宮崎栄三)

- 4 山本一雄 20 10 InSb上での α -Sn成長に関する考察
5 武石玲子 10 5 Pd/MgOモデル触媒の電子状態
6 一色信之 20 10 DV-X α 法によるSTMのシミュレーション

4:10-4:30

休憩

4:30-5:30

(座長 那須三郎)

- 7 木村仁史 20 10 シリコンクラスターの電子状態
8 福島公親 20 10 ZnSe中不純物の電子状態

5:30-6:30

写真撮影、休憩

6:30-8:30

懇親会(研究会会場と同じ、9:00閉場)

8月9日(木)

9:10-10:40

(座長 向山 毅)

- 9 中松博英 20 10 SF₆のX線吸収スペクトル
10 石川英明 20 10 シラン系分子の励起状態の計算
11 河合 潤 20 10 蛍光X線スペクトルにおける電荷移動効果

10:40-11:00 休憩

11:00-12:10

(座長 谷口 一雄)

- 12 茂木昌都 フッ化物におけるFK α サテライト π^* 軌道の化学結合効果 I
13 橋 勝 フッ化物におけるFK α サテライト π^* 軌道の化学結合効果 II
14 藤間一美 DV-X α 法を使った電荷移動衝突の計算
15 佐野 充 分子素子化について
16 向山 毅 分子の連続状態
17 柴原隆志 モリブデン硫黄クラスター錯体の電子状態
18 安井 潤 フェロセンの電子状態計算

12:10-1:30 昼食(12:30から 新館5F有栖川)

1:30-2:40

(座長 福島公親)

- 19 宮崎栄三 20 10 局所状態密度(LDOS)と表面・吸着層の電子状態
20 関根理香 銅を含む超伝導酸化物の電子状態
21 井本英夫 対称軌道作成プログラム
22 高橋昌男 窒化鉄の電子状態
23 足立裕彦 アルカリハライドはイオン結晶か?

2:40-3:00 休憩

3:00-4:00

(座長 足立裕彦)

- 24 近藤鋭治 Binding Energy 計算の試み
25 小和田善之 SiO₂ガラスに添加した各種イオンの電子状態
26 野上敦嗣 ワークステーション上でのDV-X α 法
27 田辺哲朗 黒鉛の照射損傷
28 那須三郎 金属中点欠陥研究とDV-X α
29 森永正彦 A15型金属間化合物の電子状態

4:00-4:30

討論、その他

第3回DV-X α 研究会 出席者名簿

DVX α

- 1 那須三郎 大阪大学 基礎工学部 物性物理工学科
2 宮崎栄三 東京工業大学 理学部化学科
3 草壁嘉彦 三菱電気 生産技術研究所
4 藤間一美 山梨大学 工学部
5 河合 潤 理化学研究所
6 宇田応之 早稲田大学 理工学部 材料工学科
7 橋 勝 早稲田大学 理工学部 材料工学科
8 茂木昌都 早稲田大学 理工学部 材料工学科
9 安井 潤 東洋紡績(株) 総合研究所
10 足立裕彦 兵庫教育大学
11 平田 勝 日本原子力研究所 大洗研究所
12 福島公親 東芝総合研究所 エネルギー機器研
13 田中 功 大阪大学 産業科学研究所
14 東 裕子 松下テクノリサーチ
15 森永正彦 豊橋技術科学大学 工学部
16 斉藤淳一 豊橋技術科学大学 工学部
17 尾上 順 理化学研究所
18 木村仁史 ソニー(株) 中央研究所
19 高橋昌男 大阪大学 産業科学研究所
20 森下政夫 神戸製鋼(株) 材料研究所
21 尾関 徹 兵庫教育大学 自然系
22 安盛岩雄 神奈川大学 工学部

23 柴原隆志 岡山理科大学 理学部化学科
24 山下誠一 福岡大学 理学部 化学科
25 白井泰治 京都大学工学部金属
26 大坂敏明 早稲田大学 材料技術研究所
27 武石玲子 ソニー (株) 中央研究所
28 芹沢 千絵 早稲田大学 材料技術研究所
29 山本一雄 早稲田大学 材料技術研究所
30 井本英夫 東京大学 理学部 化学科
31 小和田善之 兵庫教育大学
32 関 彰 住友金属工業 (株) 研究開発本部
33 薄木 知亮 住友金属工業 (株) 研究開発本部
34 須藤 妙子 住友金属工業 (株) 研究開発本部
35 六車 俊範 住友金属工業 (株) 研究開発本部
36 伊藤嘉昭 京都大学 化学研究所
37 中松博英 京都大学 化学研究所
38 向山 毅 京都大学 化学研究所
39 石川英明 富士通研究所 厚木研
40 佐野 充 名古屋大学教養部化学教室
41 関根理香 東京工業大学 工材研
42 伊藤秋男 理学電機工業 (株)
43 石谷明彦 日本電気 (株)
44 近藤鋭治 明治大学 理工学部 精密工学科
45 山本正弘 新日鉄 第2技研
46 野上敦嗣 新日鉄 第1技研
47 桜井照久 花王株式会社 和歌山第一研究所

48 一色 信之 花王株式会社和歌山第一研究所
49 サガラ D. A. 京セラ (株) 総合研究所
50 西田邦雄 (株) 村田製作所
51 木原 寛 兵庫教育大学
52 早藤貴範 ソニー (株) 中央研究所第5研究部
53 池田重良 龍谷大学 理工学部 物質化学科
54 田辺哲朗 大阪大学 工学部
55 片野 林太郎 京都大学 化学研究所
56 山下 祥二 京セラ (株) 総合研究所
57 丸山 哲 TDK (株) 開発研究所
58 谷口一雄 大阪電気通信大学
59 栗原 正義 日本原子力研究所 大洗研究所
60 小沢国夫 日立製作所エネルギー研究所
61 伊藤文武 群馬大学工学部電気電子工学科
62 中川 浩行 大阪大学 基礎工学部 物性物理工学科
63 阿部 知之 大阪大学 基礎工学部 物性物理工学科
64 杉山 康成 ソニー (株) 中央研究所
65 岡部 明彦 ソニー (株) 中央研究所
66 大森 広之 ソニー (株) 中央研究所
67 渋谷 忠夫 出光興産 (株) 中央研究所
68 三宅 千枝 大阪大学 工学部
69 中村 淳 早稲田大学 材料技術研究所
70 坂根弦太 岡山理科大学 理学部化学科
71 山崎幹緒 岡山理科大学 理学部化学科

8月10日(金)

時間は、目安です。

9:30-10:40 座長 足立 裕彦

足立 裕彦 連絡、その他

中松博英 SF₆とH₂SのX線吸収スペクトル

石川英明 シラン系分子の励起状態

小和田善之 PO₄(3-) クラスターの軟X線スペクトル

10:40-11:00 休憩

11:00-12:00 座長 宇田 応之

佐野 充 混合原子価錯体の電子移動吸収スペクトル

藤間一美 DV-X α を使った共鳴準位の計算について

コメント、問題提起 木村仁史、向山 毅

12:00-1:30 昼食

1:30-3:00 座長 向山 毅

関根理香 固体表面反応の励起状態

茂木昌都 フッ化物におけるFK α サテライトスペクトルの化学結合効果橘 勝 フッ化物におけるFK α サテライトスペクトルの化学結合効果

安井 潤 オージェ・スペクトル計算

コメント、問題提起 宇田 応之、足立 裕彦

3:00- 討論、その他第1回DV-X α 講習会の報告

先日研究会に先立ち、5月9日～10日に兵庫教育大学で第1回のDV-X α 法講習会を行いました。講習会の内容はDV-X α 法の簡単な説明、FACOM-M160とIBM-9370を使って簡単な分子やクラスターのDV-X α 計算の練習、そしてレベル構造や波動関数の作図ということで行いました。26名の方の参加がありました。参加を希望の方が多くありましたが、こちらの準備の都合で人数を制限せざるをえず、今回は何人かの方に御遠慮して頂きました。また講習会の時間が短く、参加者にも不満足のこと多かつたと思います。

講習会の後、多くの方に感想やご意見を頂きましたので、次回からはそれらを参考にして改善していきたいと思っております。次回の講習会は11月に山梨大学の藤間一美氏に計画して頂いております。

兵庫教育大学 足立裕彦